

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL

TRANSFORMATION DE LEGENDRE EN THÉORIE DES
ESPÈCES

MÉMOIRE

PRÉSENTÉ

COMME EXIGENCE PARTIELLE

DE LA MAÎTRISE EN MATHÉMATIQUES

PAR

WALID MATHLOUTHI

JANVIER 2007

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL
Service des bibliothèques

Avertissement

La diffusion de ce mémoire se fait dans le respect des droits de son auteur, qui a signé le formulaire *Autorisation de reproduire et de diffuser un travail de recherche de cycles supérieurs* (SDU-522 – Rév.01-2006). Cette autorisation stipule que «conformément à l'article 11 du Règlement no 8 des études de cycles supérieurs, [l'auteur] concède à l'Université du Québec à Montréal une licence non exclusive d'utilisation et de publication de la totalité ou d'une partie importante de [son] travail de recherche pour des fins pédagogiques et non commerciales. Plus précisément, [l'auteur] autorise l'Université du Québec à Montréal à reproduire, diffuser, prêter, distribuer ou vendre des copies de [son] travail de recherche à des fins non commerciales sur quelque support que ce soit, y compris l'Internet. Cette licence et cette autorisation n'entraînent pas une renonciation de [la] part [de l'auteur] à [ses] droits moraux ni à [ses] droits de propriété intellectuelle. Sauf entente contraire, [l'auteur] conserve la liberté de diffuser et de commercialiser ou non ce travail dont [il] possède un exemplaire.»

À ma chère grand mère

À mes chers parents

À mes frères et mes soeurs

À toute ma famille

À tous mes amis

À toutes les personnes qui m'ont soutenu

REMERCIEMENTS

Je tiens à adresser mes remerciements les plus sincères à mon directeur de recherche, Monsieur le professeur Pierre Leroux, qui m'a donné l'opportunité de réaliser ce travail. Sa rigueur scientifique, ses bons conseils, ses encouragements ont grandement contribué à finaliser ce travail. Je tiens également à le remercier du soutien financier qu'il m'a offert tout le long de ma maîtrise.

Je suis très sensible à l'honneur que m'ont fait Messieurs le professeur François Bergeron, le professeur Christophe Reutenauer et le professeur Gilbert Labelle en acceptant de réviser mon mémoire. Qu'ils trouvent ici mes remerciements les plus sincères.

Je voudrais aussi remercier mes parents, ma famille et mes amis qui m'ont grandement soutenu et encouragé constamment à réaliser mes rêves d'accomplir mes études supérieures.

Ma reconnaissance s'étend au personnel de l'université du Québec à Montréal.

Enfin, je remercie tous ceux qui m'ont soutenu et encouragé.

TABLE DES MATIÈRES

LISTE DES FIGURES	vi
RÉSUMÉ	ix
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I	
TRANSFORMATION DE LEGENDRE EN ANALYSE	4
1.1 Analyse convexe	4
1.2 Transformation de Legendre	7
1.2.1 Transformation de Legendre des formes quadratiques	11
1.3 Inégalité de Young	24
CHAPITRE II	
TRANSFORMATION DE LEGENDRE EN THERMODYNAMIQUE	26
2.1 Équations fondamentales	28
2.2 Potentiels thermodynamiques	29
2.2.1 Fonction énergie libre	29
2.2.2 Fonction enthalpie	30
2.2.3 Fonction enthalpie libre	31
2.2.4 Fonction grand potentiel	32
2.3 Fonction de partition et équation d'état pour un gaz imparfait	33
2.4 Fonction de partition et potentiels thermodynamiques	36
2.5 Distribution grand-canonique et potentiels thermodynamiques	41
CHAPITRE III	
THÉORIE DES ESPÈCES ET GRAPHS IRRÉDUCTIBLES	43
3.1 Graphes simples, graphes connexes	43
3.2 Espèces	44
3.3 Séries formelles associées	45
3.4 Graphes inséparables (2-connexes)	50
3.5 Graphes irréductibles	56

3.6 Compléments sur l'inversion des espèces de structures	68
CHAPITRE IV	
TRANSFORMATION DE LEGENDRE EN THÉORIE DES ESPÈCES	72
4.1 Transformation de Legendre d'une espèce à une sorte	72
4.2 Transformation de Legendre d'une espèce à deux sortes par rapport à une sorte	74
4.3 Transformation de Legendre de l'espèce $V_M(X, Z)$	75
4.3.1 Exemple : $M = X$, la classe des graphes à un sommet	77
4.4 Transformation de Legendre de l'espèce $B(X, Z)$	79
4.5 Généralisation	82
CONCLUSION	94
BIBLIOGRAPHIE	95

LISTE DES FIGURES

1.1	Transformée de Legendre: $g(p) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (p \cdot x - f(x))$	9
1.2	Un ressort.	20
2.1	La fonction $\varphi(r)$	33
3.1	Un graphe simple connexe.	44
3.2	Un graphe simple g avec ses composantes connexes.	47
3.3	Trois exemples de graphes inséparables.	47
3.4	Un arbre.	48
3.5	Théorème de dissymétrie pour les arbres.	50
3.6	a) Un graphe connexe g , b) le b-graphe de g , c) le bc-arbre $bc(g)$	51
3.7	$C'_B = E(B'(C_B^\bullet))$	52
3.8	Théorème de dissymétrie pour les graphes.	54
3.9	$C - C_B = N_B(C_B^\bullet)$	57
3.10	Trois exemples de graphes irréductibles.	58
3.11	$C_M^\bullet = M^\bullet(X \cdot E(C_M^\bullet))$	58
3.12	$C_{M,b}^\bullet(X) = M^\bullet(X \cdot E(bC_{M,b}^\bullet(X)))$	59
3.13	Théorème de dissymétrie pour les C_M -graphes.	60

3.14	$C_{M,b}^m = M \left(X \cdot E \left(bC_{M,b}^\bullet \right) \right)$	61
3.15	$C_{M,b}^{im} = b \left(C_{M,b}^\bullet \right)^2$	62
3.16	Un M -graphe avec "pieds".	62
3.17	$\frac{\partial}{\partial Z} M(XE(Z)) = M^\bullet(XE(Z))$	63
3.18	$\mathcal{G}_M(X, T) = bE_2(T) + C_{M,b}(XE(bT))$	64
3.19	$\mathcal{A}_M(X, T) = bT + bM^\bullet(XE(\mathcal{A}_M(X, T)))$	66
3.20	Théorème de dissymétrie pour les C_M -graphes avec pieds.	67
3.21	$\mathcal{G}_M^m(X, T) = M(XE(\mathcal{A}_M))$	68
3.22	$\mathcal{G}_M^{im}(X, T) = \frac{1}{b}\mathcal{A}_M(\mathcal{A}_M - bT)$	69
3.23	Une G -arborescence.	70
4.1	$\mathcal{A}_M(X, T) = bT + bXE(\mathcal{A}_M(X, T))$	78
4.2	$\mathbf{A}(X, T) = bT + bXE_{\geq 1}(\mathbf{A}(X, T))$	79
4.3	a) Un graphe g , b) le multigraphe induit g_π .	83
4.4	Une Note.	83
4.5	a) Un \mathfrak{C}_N -graphe g , b) le multigraphe induit g_π .	84
4.6	$\mathfrak{C}_N^\bullet = N^\bullet(X \cdot E(\mathfrak{C}_N^\bullet))$	85
4.7	$\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(X) = N^\bullet \left(X \cdot E \left(b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(X) \right) \right)$	86
4.8	théorème de dissymétrie pour les \mathfrak{C}_N -graphes.	87
4.9	Une note avec pieds.	88
4.10	$\mathcal{G}_N(X, T) = bE_2(T) + \mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT))$	90

4.11 $\mathcal{A}_N(X, T) = bT + bN^\bullet(XE(\mathcal{A}_N(X, T)))$	91
---	----

RÉSUMÉ

La transformation de Legendre envoie des fonctions convexes définies sur un espace vectoriel à des fonctions convexes définies sur l'espace vectoriel dual. Elle est reliée à la dualité projective, aux coordonnées tangentielles en géométrie algébrique et à la construction des espaces de Banach duaux en analyse. On l'utilise aussi en mécanique statistique pour définir des potentiels thermodynamiques à partir des fonctions de variables d'état. Plus précisément, la transformation de Legendre permet de transformer une fonction d'état d'un système en une autre fonction d'état mieux adaptée à un problème particulier.

Le chapitre un se veut un résumé des résultats connus à propos de la transformation de Legendre en analyse. Nous donnons plusieurs exemples afin d'illustrer les propriétés essentielles de cette transformation.

Dans le chapitre deux, nous rappelons quelques notions en thermodynamique statistique : Les variables intensives, les variables extensives, l'énergie interne, l'entropie. Ensuite nous définissons les potentiels thermodynamiques qui sont des transformées de Legendre de l'énergie interne.

Dans le chapitre trois, nous rappelons des résultats fondamentaux de la théorie des espèces de structures. Mentionnons en particulier le théorème de dissymétrie pour les arbres et pour les graphes, ainsi que les équations fonctionnelles fondamentales pour les C_B -graphes, i.e les graphes connexes dont tous les blocs sont dans une classe des graphes inséparables B , ainsi que pour les C_M -graphes, i.e les graphes connexes dont toutes les mottes sont dans une classe de graphes irréductibles (2-arêtes-connexes).

Dans le chapitre quatre, nous donnons la définition de la transformation de Legendre pour les espèces de structures à une sorte ou à deux sortes par rapport à une sorte. En effet, Pierre Leroux a été le premier à relier ces deux notions (Transformation de Legendre et espèces de structures). Il a démontré (Leroux, 2003) que les C_M -graphes sont liés au M -graphes par transformation de Legendre. Dans ce mémoire on montre par une construction originale que l'espèce M des graphes irréductibles peut être remplacée par une espèce N quelconque, avec $N[0] = 0$.

Mots clés : Fonctions convexes, ensembles convexes, transformation de Legendre, potentiels thermodynamiques, énergie interne, fonction de partition, graphes, isthme, bloc, motte, graphes inséparables, graphes irréductibles, espèce de structures, note.

INTRODUCTION

La transformation de Legendre est d'abord définie pour les fonctions convexes. Deux fonctions dérivables et convexes f et g sont reliées par la transformation de Legendre si et seulement si $df = (dg)^{[-1]}$. Autrement dit, f et g sont telles que l'une est la transformée de Legendre de l'autre si et seulement si leurs dérivées premières sont telles que l'une est la fonction inverse de l'autre. Par conséquent, la transformation de Legendre est clairement une involution. Mentionnons qu'une fonction et sa transformée de Legendre n'ont pas nécessairement le même domaine. En effet, les fonctions réelles d'une variable réelle $x : x \mapsto \exp(x)$ et $x \mapsto x \ln(x) - x$, sont telles que l'une est la transformée de Legendre de l'autre mais leurs domaines sont différents.

Le nom transformation de Legendre provient du mathématicien français Adrien-Marie Legendre (1752-1833). Il fit d'importantes contributions aux statistiques, à la théorie des nombres, aux algèbres abstraites et à l'analyse.

La transformation de Legendre envoie des fonctions définies sur un espace vectoriel à des fonctions définies sur l'espace vectoriel dual. Elle est reliée à la dualité projective, aux coordonnées tangentielles en géométrie algébrique et à la construction des espaces de Banach duaux en analyse. On l'utilise aussi en mécanique statistique pour définir des potentiels thermodynamiques à partir des fonctions de variables d'état. Plus précisément, la transformation de Legendre permet de transformer une fonction d'état d'un système en une autre fonction d'état mieux adaptée à un problème particulier. Par exemple la fonction d'état énergie interne d'un système thermodynamique qui est une fonction des variables extensives, entropie, volume et nombre de moles, a une transformée de Legendre par rapport au volume, l'enthalpie, qui est une nouvelle fonction dont les variables sont : l'entropie, le nombre de moles et la pression. Notons aussi que l'énergie libre, l'enthalpie libre et le grand potentiel sont obtenues comme des transformées de Legendre de la

fonction énergie interne.

La transformation de Legendre est le thème principal de ce travail. Notre étude s'appuie essentiellement sur les quatre références suivantes : "Mathematical Methods of Classical Mechanics" (Arnold, 74), pour le chapitre un, "Thermodynamique" (Hulin, 89), pour le chapitre 2, "Théorie des espèces et combinatoire des structures arborescentes" (Bergeron, Labelle, Leroux, 94) pour le chapitre trois, et l'exposé de Pierre Leroux à Bertinoro au séminaire lotharingien de combinatoire, intitulé "Note on Legendre transform and line-irreducible graphs" (Leroux, 03) pour le chapitre quatre.

Le chapitre un se veut un résumé des résultats connus à propos de la transformation de Legendre en analyse. Nous donnons plusieurs exemples afin d'illustrer les propriétés essentielles de cette transformation. Les fonctions convexes trouvent une place prépondérante dans la première partie (Berkovitz, 2002). Finalement, nous mentionnons l'inégalité de Young qui sert à obtenir certaines estimations.

Dans le chapitre deux, nous rappelons quelques notions en thermodynamique statistique : Les variables intensives, les variables extensives, l'énergie interne, l'entropie. Ensuite nous définissons les potentiels thermodynamiques qui sont des transformées de Legendre de l'énergie interne. À la fin de ce chapitre nous donnons la fonction de partition et la fonction de partition grand canonique d'un gaz imparfait ainsi que le lien entre eux et les potentiels thermodynamiques.

Dans le chapitre trois, nous rappelons des résultats fondamentaux de la théorie des espèces de structures. Mentionnons en particulier le théorème de dissymétrie pour les arbres et pour les graphes, ainsi que les équations fonctionnelles fondamentales pour les C_B -graphes, i.e les graphes connexes dont tous les blocs sont dans une classe de graphes inséparables (2-sommets connexes) B , ainsi que pour les C_M -graphes, i.e les graphes connexes dont toutes les mottes sont dans une classe de graphes irréductibles (2-arêtes connexes) M . Ensuite nous donnons la définition de l'espèce pondérée $\mathcal{G}_M(X, T)$ des graphes connexes à deux sortes avec pieds, où M est une classe de graphes irréductibles, ainsi que le théorème de dissymétrie pour les $\mathcal{G}_M(X, T)$ -graphes. À la fin de ce chapitre

nous rappelons quelques notions sur l'inversion des espèces, ainsi que le théorème des espèces implicites.

Dans le chapitre quatre, nous donnons la définition de la transformation de Legendre pour les espèces de structures à une sorte ou à deux sortes par rapport à une sorte. Ensuite nous montrons que les C_M -graphes sont liées aux M -graphes par transformation de Legendre. Finalement, nous montrons par une construction originale que l'espèce M de graphes irréductibles utilisée dans la définition de l'espèce $\mathcal{G}_M(X, T)$ peut être remplacée par une espèce N quelconque, avec $N[0] = 0$.

Via la théorie de Mayer le logarithme $\ln(Z_{gr}(V, T, z))$, où $Z_{gr}(V, T, z)$ désigne la distribution grand-canonique, est égale à la série génératrice exponentielle de l'espèce des graphes connexes pondérés. En appliquant la transformation de Legendre à l'espèce des graphes connexes on obtient l'espèce des graphes irréductibles qui correspond à un potentiel thermodynamique mieux adapté au système particulier (Vasiliev, 98).

CHAPITRE I

TRANSFORMATION DE LEGENDRE EN ANALYSE

Dans ce chapitre, nous présentons des résultats connus à propos de la transformation de Legendre en analyse. Nous donnons plusieurs exemples afin d'illustrer les propriétés essentielles de cette transformation. Les fonctions convexes trouvent une place prépondérante dans la première partie (Berkovitz, 2002). Finalement, nous mentionnons l'inégalité de Young qui sert à obtenir certaines estimations (Arnold, 1974).

1.1 Analyse convexe

Définition 1.1

Un ensemble U de \mathbb{R}^n est dit *convexe* si et seulement si pour tout $x, y \in U$, et pour tout $t \in [0, 1]$, $tx + (1 - t)y \in U$.

Définition 1.2

Une fonction f définie sur un ensemble ouvert convexe U de \mathbb{R}^n et à valeurs dans \mathbb{R} est dite *convexe* si et seulement si pour tous les couples $(x, y) \in U \times U$ et pour tout $t \in [0, 1]$, on a l'inégalité de convexité suivante :

$$f(tx + (1 - t)y) \leq tf(x) + (1 - t)f(y). \quad (1.1)$$

Si l'inégalité de convexité est stricte, alors f est dite *strictement convexe*.

Exemple 1.1

La fonction $x \mapsto \|x\|$ est convexe sur \mathbb{R}^n , où $\|\cdot\|$ désigne une norme sur \mathbb{R}^n . En effet, pour tout $t \in [0, 1]$ et pour tout $(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ on a :

$$\begin{aligned} \|tx + (1-t)y\| &\leq \|tx\| + \|(1-t)y\| \text{ (d'après l'inégalité triangulaire)} \\ &= t\|x\| + (1-t)\|y\|. \end{aligned}$$

Théorème 1.1

Soit f une fonction de classe C^1 sur un ensemble ouvert convexe U de \mathbb{R}^n , i.e f est une fonction dérivable, dont les dérivées partielles sont continues sur U . Alors f est convexe sur U si et seulement si

$$f(x) \geq f(y) + \langle \nabla f(y), x - y \rangle \quad (1.2)$$

pour tout $x, y \in U$, et elle strictement convexe si et seulement si

$$f(x) > f(y) + \langle \nabla f(y), x - y \rangle \quad (1.3)$$

pour tout $x, y \in U$. Où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ dénote le produit scalaire dans \mathbb{R}^n , et $\nabla f(y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial y_1}(y) \\ \frac{\partial f}{\partial y_2}(y) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial y_n}(y) \end{pmatrix}$

dénote le gradient de f . Voir (Berkovitz, 2002).

Théorème 1.2

Soit f une fonction de classe C^2 sur un ensemble ouvert convexe U de \mathbb{R}^n , i.e f est une fonction deux fois dérivable, dont les dérivées partielles sont continues sur U . Alors f est convexe sur U si et seulement si sa matrice *hessienne*

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x) \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

est semi-définie positive pour tout $x \in U$. Si $\nabla^2 f$ est définie positive pour tout $x \in U$ alors f est strictement convexe. Voir (Berkovitz, 2002).

Puisque f est de classe C^2 sur U alors $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(x)$ pour tout $x \in U$. Cela implique que $\nabla^2 f$ est une matrice symétrique.

Rappelons qu'une matrice A est semi-définie positive si et seulement si elle possède un mineur principal d'ordre r (où $r = \text{rang}(A) < \text{ordre}(A)$) dont les mineurs principaux croissants ont tous un déterminant positif, et elle est définie positive si et seulement si les déterminants de tous ses mineurs principaux croissants sont positifs.

Exemple 1.2

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x_1, x_2) &\longmapsto x_1^4 + x_1^2 + x_2^2 + x_1 x_2, \end{aligned}$$

est strictement convexe sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$. En effet,

$$\begin{aligned} \nabla^2 f(x) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_1}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_2}(x) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 12x_1^2 + 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

est définie positive car $p_1 = 12x_1^2 + 2 > 0$ pour tout $x_1 \in \mathbb{R}$, et $p_2 = \begin{vmatrix} 12x_1^2 + 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 24x_1^2 + 2 > 0$ pour tout $x_1 \in \mathbb{R}$.

Remarque 1.1

i) Si $f : I \longrightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^1 sur un intervalle I de \mathbb{R} . Alors f est convexe si et seulement si f' est croissante sur I , et elle est strictement convexe si et seulement si f' est strictement croissante sur I .

ii) Si $f : I \longrightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^2 sur un intervalle I de \mathbb{R} . Alors f est convexe si et seulement si $f'' \geq 0$, et elle est strictement convexe si et seulement si $f'' > 0$.

1.2 Transformation de Legendre

Définition 1.3

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe sur \mathbb{R}^n . Sa *transformée de Legendre* est la fonction convexe $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ définie par

$$g(p) = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (\langle p, x \rangle - f(x)), \quad (1.5)$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ dénote le produit scalaire dans \mathbb{R}^n .

Proposition 1.1

g est une fonction convexe sur \mathbb{R}^n . En effet, soit $p, q \in \mathbb{R}^n$ et $t \in [0, 1]$, on a alors :

$$\begin{aligned} g(tq + (1-t)p) &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (\langle tq + (1-t)p, x \rangle - f(x)) \\ &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (\langle tq, x \rangle + \langle (1-t)p, x \rangle - f(x)) \\ &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (t \langle q, x \rangle + (1-t) \langle p, x \rangle - f(x)) \\ &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (t (\langle q, x \rangle - f(x)) + (1-t) (\langle p, x \rangle - f(x))) \\ &\leq t \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (\langle q, x \rangle - f(x)) + (1-t) \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (\langle p, x \rangle - f(x)) \\ &= tg(q) + (1-t)g(p). \end{aligned}$$

Remarque 1.2

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe de classe C^1 . Alors la fonction $x \mapsto \langle p, x \rangle - f(x)$ atteint son supremum sur \mathbb{R}^n en un point unique $x(p) \in \mathbb{R}^n$. Ainsi

$$[\nabla (\langle p, x \rangle - f(x))]_{x=x(p)} = 0,$$

implique

$$[\nabla (\langle p, x \rangle)]_{x=x(p)} = [\nabla (f(x))]_{x=x(p)}$$

implique

$$\left[\nabla \left(\sum_{i=1}^n p_i x_i \right) \right]_{x=x(p)} = [\nabla (f(x))]_{x=x(p)}$$

implique

$$p = [\nabla f(x)]_{x=x(p)}. \quad (1.6)$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} g(p) &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (\langle p, x \rangle - f(x)) \\ &= \langle p, x(p) \rangle - f(x(p)). \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$\begin{aligned} \text{On a que } \nabla f(x) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix} \text{ et si } p = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix} \text{ alors} \\ &\left\{ \begin{array}{l} p_1 = \frac{\partial f}{\partial x_1}(x(p)) \\ p_2 = \frac{\partial f}{\partial x_2}(x(p)) \\ \vdots \\ p_n = \frac{\partial f}{\partial x_n}(x(p)). \end{array} \right. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Remarque 1.3

Prenons le cas où $n = 1$. Si $x \in \mathbb{R}$, et $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe *de classe* C^1 sur \mathbb{R} , sa transformée de Legendre est la fonction g de variable p définie comme suit :

$$g(p) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (px - f(x)),$$

qui représente la distance maximale entre la courbe de f et la droite d'équation $y = px$ en direction verticale. On peut examiner la figure 1.1 ci dessous, g est la transformée de Legendre de la fonction f par rapport à x donc $g(p) = p.x(p) - f(x(p))$ où le point $x(p)$ est défini par la condition extrême $\frac{\partial}{\partial x}(px - f(x)) = 0$, c'est à dire $f'(x(p)) = p$. Puisque f est convexe, le point $x(p)$ est unique.

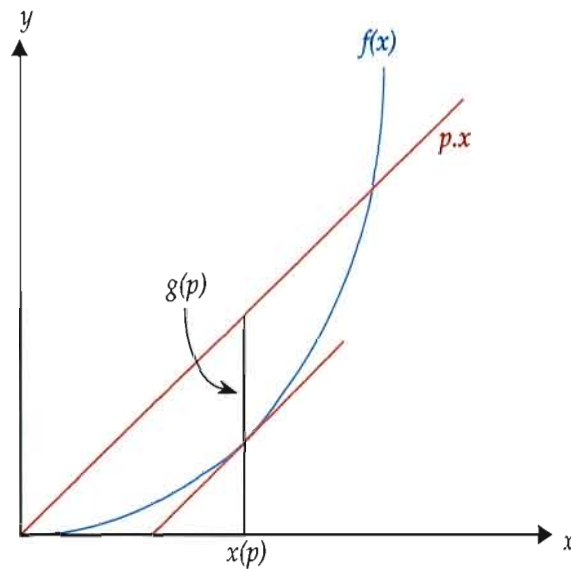


Figure 1.1 Transformée de Legendre : $g(p) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (p \cdot x - f(x))$.

Exemple 1.3

Soit $f(x) = x^2$. Alors $f'(x) = 2x$. On a $f'(x(p)) = p$ implique $x(p) = \frac{p}{2}$. Ainsi,

$$\begin{aligned} g(p) &= px(p) - x^2(p) \\ &= p \frac{p}{2} - \frac{p^2}{4} \\ &= \frac{p^2}{4}. \end{aligned}$$

Exemple 1.4

Plus généralement, soit $f(x) = \frac{mx^2}{2}$, $m \in]0, +\infty[$. Alors $f'(x) = m \cdot x$. On a

$f'(x(p)) = p$ implique $x(p) = \frac{p}{m}$. Ainsi,

$$\begin{aligned} g(p) &= px(p) - \frac{mx^2(p)}{2} \\ &= \frac{p^2}{m} - \frac{m \frac{p^2}{m^2}}{2} \\ &= \frac{p^2}{m} - \frac{p^2}{2m} \\ &= \frac{p^2}{2m}. \end{aligned}$$

Exemple 1.5

Soit $f(x) = \frac{a}{2}x^2 + bx + c$, avec $a \in [0, +\infty[$ et $b, c \in \mathbb{R}$. Alors $f'(x) = ax + b$. On a $f'(x(p)) = p$ implique $x(p) = \frac{p}{a} - \frac{b}{a}$. Ainsi,

$$\begin{aligned} g(p) &= px(p) - f(x(p)) \\ &= p \left(\frac{p}{a} - \frac{b}{a} \right) - f \left(\frac{p}{a} - \frac{b}{a} \right) \\ &= \frac{p^2}{a} - \frac{bp}{a} - \frac{a}{2} \left(\frac{p^2}{a^2} + \frac{b^2}{a^2} - 2\frac{pb}{a^2} \right) + \frac{bp}{a} - \frac{b^2}{a} + c \\ &= \frac{1}{2a}p^2 + \frac{b}{a}p - \frac{3b^2}{2a} + c \\ &= \frac{1}{2a}p^2 + \frac{b}{a}p + \frac{2ac - 3b^2}{2a}. \end{aligned}$$

Remarque 1.4

Si $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction convexe de classe C^1 sur un intervalle I de \mathbb{R} , alors sa transformée de Legendre est la fonction $g : I' \rightarrow \mathbb{R}$ donnée par

$$g(p) = \sup_{x \in I} (px - f(x)).$$

Exemple 1.6

Soit $f(x) = 1 - \cos(x)$, une fonction définie sur l'intervalle $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$. On a que $f(x)$ est une fonction convexe sur $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$. En effet,

$$f'(x) = \sin(x),$$

implique

$$f''(x) = \cos(x) \geq 0 \text{ sur } \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right].$$

Soit $g(p)$ la transformée de Legendre de $f(x)$, alors

$$\begin{aligned} g(p) &= \sup_{x \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]} (px - f(x)) \\ &= px(p) - f(x(p)). \end{aligned}$$

Puisque $f'(x) = \sin(x)$. On a $f'(x(p)) = p$ implique $x(p) = \arcsin(p)$. Ainsi,

$$\begin{aligned} g(p) &= p \arcsin(p) - f(\arcsin(p)) \\ &= p \arcsin(p) - (1 - \cos(\arcsin(p))) \\ &= p \arcsin(p) + \cos(\arcsin(p)) - 1 \\ &= p \arcsin(p) + \sqrt{1 - p^2} - 1. \end{aligned}$$

$$I' = \text{domaine}(g) = [-1, 1].$$

1.2.1 Transformation de Legendre des formes quadratiques

Exemple 1.7

Soit $f(X) = \frac{1}{2}X^TAX$ une forme quadratique définie positive d'ordre n , i.e $f(X) > 0$ pour tout $X \in \mathbb{R}^n \setminus \{0_{\mathbb{R}^n}\}$, où A est une matrice symétrique définie positive d'ordre n .

On a :

$$\begin{aligned} \nabla f(X) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(X) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(X) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(X) \end{pmatrix} \\ &= AX. \end{aligned}$$

En effet,

$$\begin{aligned}
 f(X) &= \frac{1}{2} X^T A X \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j \text{ (où } a_{ij} \text{ sont les entrées de la matrice } A, \text{ avec } a_{ij} = a_{ji}) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n a_{ii} x_i^2 + 2 \sum_{i < j} a_{ij} x_i x_j \right), \text{ (car } A \text{ est une matrice symétrique, } a_{ij} = a_{ji}) \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \dots + a_{nn}x_n^2 + 2a_{12}x_1x_2 + 2a_{13}x_1x_3 + \dots + 2a_{1n}x_1x_n + \\ 2a_{23}x_2x_3 + \dots + 2a_{2n}x_2x_n + \dots + 2a_{(n-1)n}x_{n-1}x_n \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

implique

$$\begin{aligned}
 \nabla f(X) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(X) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(X) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(X) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(2a_{11}x_1 + 2a_{12}x_2 + 2a_{13}x_3 + \dots + 2a_{1n}x_n) \\ \frac{1}{2}(2a_{22}x_2 + 2a_{12}x_1 + 2a_{23}x_3 + \dots + 2a_{2n}x_n) \\ \vdots \\ \frac{1}{2}(2a_{nn}x_n + 2a_{1n}x_1 + 2a_{2n}x_2 + \dots + 2a_{(n-1)n}x_{n-1}) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ a_{12}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{1n}x_1 + a_{2n}x_2 + \dots + a_{nn}x_n \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \\
 &= AX.
 \end{aligned}$$

Puisque la matrice A est définie positive, alors f est en fonction convexe, car sa matrice

hessienne est égale à A ,

$$\nabla^2 f(X) = A.$$

Soit $g(Y)$ la transformée de Legendre de la fonction f pour la variable $X \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} g(Y) &= \sup_{X \in \mathbb{R}^n} (\langle Y, X \rangle - f(X)) \\ &= \langle Y, X(Y) \rangle - f(X(Y)) \\ &= Y^T X(Y) - f(X(Y)), \end{aligned}$$

où T désigne la transposition et $X(Y)$ vérifie l'égalité suivante :

$$\nabla f(X(Y)) = AX(Y),$$

ce qui implique

$$X(Y) = A^{-1}Y.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} g(Y) &= Y^T X(Y) - f(X(Y)) \\ &= Y^T X(Y) - \frac{1}{2} X^T(Y) A X(Y) \\ &= Y^T A^{-1}Y - \frac{1}{2} (A^{-1}Y)^T A A^{-1}Y \\ &= Y^T A^{-1}Y - \frac{1}{2} Y^T (A^{-1})^T Y \\ &= Y^T A^{-1}Y - \frac{1}{2} Y^T (A^T)^{-1} Y \\ &= Y^T A^{-1}Y - \frac{1}{2} Y^T A^{-1}Y \\ &= \frac{1}{2} Y^T A^{-1}Y. \end{aligned}$$

Exemple 1.8

Soit $f(X) = \frac{1}{2}X^T A X + X^T V + a$, où A est définie positive d'ordre n , $V \in \mathbb{R}^n$ et $a \in \mathbb{R}$.

On a alors :

$$\begin{aligned}
 \nabla f(X) &= \nabla \left(\frac{1}{2} X^T A X + X^T V + a \right) \\
 &= \nabla \left(\frac{1}{2} X^T A X \right) + \nabla (X^T V + a) \\
 &= A X + V.
 \end{aligned}$$

Soit $g(Y)$ la transformée de Legendre de la fonction f pour la variable X ,

$$\begin{aligned}
 g(Y) &= \sup_{X \in \mathbb{R}^n} (\langle Y, X \rangle - f(X)) \\
 &= \langle Y, X(Y) \rangle - f(X(Y)) \\
 &= Y^T X(Y) - f(X(Y)),
 \end{aligned}$$

où $X(Y)$ vérifie l'égalité suivante :

$$\nabla f(X(Y)) = A X(Y) + V,$$

implique

$$X(Y) = A^{-1}(Y - V).$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
 g(Y) &= Y^T X(Y) - f(X(Y)) \\
 &= Y^T X(Y) - \frac{1}{2} X^T(Y) A X(Y) - X^T(Y) V - a \\
 &= Y^T A^{-1}(Y - V) - \frac{1}{2} (A^{-1}(Y - V))^T A A^{-1}(Y - V) - (Y - V)^T (A^{-1})^T V - a \\
 &= Y^T A^{-1}(Y - V) - \frac{1}{2} (Y - V)^T A^{-1}(Y - V) - V^T A^{-1}(Y - V) - a \\
 &= (Y - V)^T A^{-1}(Y - V) - \frac{1}{2} (Y - V)^T A^{-1}(Y - V) - a \\
 &= \frac{1}{2} (Y - V)^T A^{-1}(Y - V) - a.
 \end{aligned}$$

Exemple 1.9

Soit $f(X) = \frac{1}{2}X^TAX$ une forme quadratique définie positive d'ordre 3, avec $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 3 & -4 \\ 2 & -4 & 11 \end{pmatrix}$. A est définie positive car $p_1 = 1 > 0$, $p_2 = \det \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} = 2 > 0$ et $p_3 = \det \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 3 & -4 \\ 2 & -4 & 11 \end{pmatrix} = 10 > 0$.

$$\begin{aligned} f(X) &= \frac{1}{2}X^TAX \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 3 & -4 \\ 2 & -4 & 11 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (x_1^2 - 2x_1x_2 + 4x_1x_3 + 3x_2^2 - 8x_2x_3 + 11x_3^2). \end{aligned}$$

Soit $g(Y)$ la transformée de Legendre de $f(X)$ par rapport à X , d'après ce qui précède on en déduit :

$$\begin{aligned} g(Y) &= \frac{1}{2}Y^T A^{-1}Y \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & y_3 \end{pmatrix} \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 17 & 3 & -2 \\ 3 & 7 & 2 \\ -2 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{20} (17y_1^2 + 6y_1y_2 - 4y_1y_3 + 7y_2^2 + 4y_2y_3 + 2y_3^2). \end{aligned}$$

Notation

Notons par $\mathcal{L}(f)(p) = g(p)$ la transformée de Legendre de la fonction f .

Remarque 1.5

Soit $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction dérivable convexe. On note par g la transformée de

Legendre de la fonction $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ pour les variables x_1 et x_2 :

$$\begin{aligned} g(p_1, p_2, x_3, \dots, x_n) &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} (p_1 x_1 + p_2 x_2 - f(x_1, x_2, \dots, x_n)), \\ &= p_1 x_1(p) + p_2 x_2(p) - f(x(p)), \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\text{où } x(p) = \begin{pmatrix} x_1(p) \\ x_2(p) \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \text{ est déterminé par les relations suivantes :}$$

$$p_1 = \frac{\partial f}{\partial x_1}(x(p)) \text{ et } p_2 = \frac{\partial f}{\partial x_2}(x(p)). \quad (1.10)$$

Exemple 1.10

Soit la fonction

$$\begin{aligned} f : \quad \mathbb{R}^3 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x_1, x_2, x_3) &\longmapsto x_1^2 + 2x_1x_2 + 4x_1x_3 + 3x_2^2 + x_2x_3 + 7x_3^2. \end{aligned}$$

f est strictement convexe. En effet,

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 2 & 6 & 1 \\ 4 & 1 & 14 \end{pmatrix},$$

est définie positive car les déterminants de tous ses mineurs principaux croissants sont positifs. Soit g sa transformée de Legendre pour les variables x_1 et x_2 , alors

$$\begin{aligned} g(p_1, p_2, x_3) &= \sup_{x \in \mathbb{R}^3} (p_1 x_1 + p_2 x_2 - f(x_1, x_2, x_3)), \\ &= p_1 x_1(p) + p_2 x_2(p) - f(x_1(p), x_2(p), x_3) \end{aligned}$$

où $x(p) = \begin{pmatrix} x_1(p) \\ x_2(p) \\ x_3 \end{pmatrix}$ est déterminé par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{\partial f}{\partial x_1}(x(p)) \\ &= 2x_1(p) + 2x_2(p) + 4x_3 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} p_2 &= \frac{\partial f}{\partial x_2}(x(p)) \\ &= 2x_1(p) + 6x_2(p) + x_3 \end{aligned}$$

implique

$$x_1(p) = \frac{3}{4}p_1 - \frac{1}{4}p_2 - \frac{11}{4}x_3$$

et

$$x_2(p) = -\frac{1}{4}p_1 + \frac{1}{4}p_2 + \frac{3}{4}x_3.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} g(p_1, p_2, x_3) &= p_1 x_1(p) + p_2 x_2(p) - f(x_1(p), x_2(p), x_3) \\ &= p_1 x_1(p) + p_2 x_2(p) - x_1^2(p) - 2x_1(p)x_2(p) - 4x_1(p)x_3 - 3x_2^2(p) \\ &\quad - x_2(p)x_3 - 7x_3^2 \\ &= \frac{3}{8}p_1^2 + \frac{1}{8}p_2^2 - \frac{1}{4}p_1 p_2 - \frac{11}{4}p_1 x_3 + \frac{3}{4}p_2 x_3 - \frac{15}{8}x_3^2. \end{aligned}$$

Lemme 1.1

Soit $g(p) = \mathcal{L}(f)(p)$ la transformée de Legendre de la fonction f , où f est une fonction convexe de classe C^1 sur \mathbb{R} . Alors $\frac{dg}{dp}(p) = x(p)$, où $x(p)$ est la solution de l'équation $p = \frac{df}{dx}(x(p))$. (Arnold, 1974)

Preuve

Soit g la transformée de Legendre de f par rapport à x , alors $g(p) = p \cdot x(p) - f(x(p))$, où $x(p)$ est défini par $p = \frac{df}{dx}(x(p))$. Donc

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dp}(p) &= p \cdot \frac{dx}{dp}(p) + x(p) - \frac{df}{dx}(x(p)) \cdot \frac{dx}{dp}(p) \\ &= x(p) + \frac{dx}{dp}(p) \left(p - \frac{df}{dx}(x(p)) \right) \\ &= x(p). \end{aligned} \tag{1.11}$$

□

Par conséquent, si $g(p) = \mathcal{L}(f)(p)$, alors

$$\begin{aligned} \frac{d^2g}{dp^2}(p) &= \frac{d}{dp}(x(p)) \\ &= \frac{d}{dp} \left(x \left(\frac{df}{dx}(x(p)) \right) \right) \\ &= \frac{dx}{dp} \left(\frac{df}{dx}(x(p)) \right) \cdot \frac{d^2f}{dx^2}(x(p)) \cdot \frac{dx}{dp}(p) \\ &= \frac{dx}{dp}(p) \cdot \frac{d^2f}{dx^2}(x(p)) \cdot \frac{dx}{dp}(p) \\ &= \left(\frac{dx}{dp}(p) \right)^2 \cdot \frac{d^2f}{dx^2}(x(p)) \\ &\geq 0, \text{ car } f \text{ est convexe,} \end{aligned}$$

ce qui prouve encore que g est convexe sur \mathbb{R} .

On peut montrer maintenant que la transformation de Legendre est involutive.

Théorème 1.3

La transformation de Legendre est *involutive*. C'est-à-dire, si g est la transformée de Legendre de f alors f est la transformée de Legendre de g , i.e.

$$\mathcal{L}(\mathcal{L}(f))(x) = f(x). \tag{1.12}$$

(Arnold, 1974).

Preuve :

Arnold a donné une preuve géométrique basée sur le fait que si $g(p) = \mathcal{L}(f)(p)$ alors la droite d'équation $y = x.p - g(p)$ de pente p est tangente au graphique de f . Puisque f est convexe alors toutes les tangentes sont au dessous de la courbe de f . Si on fixe $x = x_0$, alors la valeur maximale de $x_0.p - g(p)$ comme fonction en p est $f(x_0)$. En effet pour $x = x_0$,

$$\begin{aligned} g(p) &= \sup_{x \in \mathbb{R}} (px_0 - f(x_0)) \\ &= px_0 - f(x_0), \end{aligned}$$

implique

$$f(x_0) = px_0 - g(p).$$

Donc

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathcal{L}(f))(x_0) &= \mathcal{L}(g)(x_0) \\ &= \sup_{p \in \mathbb{R}} (x_0.p - g(p)) \\ &= f(x_0). \end{aligned}$$

On peut aussi démontrer le théorème 1.1 algébriquement en utilisant le lemme 1.1. On a $g(p) = \mathcal{L}(f)(p)$ et nous calculons

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathcal{L}(f))(x) &= \mathcal{L}(g)(x) \\ &= xp(x) - g(p(x)), \end{aligned}$$

où $p(x)$ est défini par $x = \left(\frac{dg}{dp}\right)(p(x))$.

Supposons que $g(p) = p.y(p) - f(y(p))$, où $y(p)$ est définie par $p = \left(\frac{df}{dx}\right)(y(p))$. D'après le lemme 1.1, on a $\left(\frac{dg}{dp}\right)(p) = y(p)$, ce qui implique

$$\begin{aligned} x &= \left(\frac{dg}{dp} \right) (p(x)) \\ &= y(p(x)), \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathcal{L}(f))(x) &= \mathcal{L}(g)(x) \\ &= x.p(x) - g(p(x)) \\ &= y(p(x)).p(x) - [p(x)y(p(x)) - f(y(p(x)))] \\ &= xp(x) - p(x)x + f(x) \\ &= f(x). \end{aligned}$$

Exemple 1.11

Prenons un exemple simplifié pour qu'on comprenne bien le principe de la transformation de Legendre. Soit $E(x)$ le potentiel élastique d'un ressort

$$E(x) = \frac{k}{2} (x - x_0)^2,$$

où $k > 0$ est la constante de raideur propre au ressort, x_0 est la position de l'extrémité du ressort à l'équilibre et x est la position de l'extrémité du ressort à un instant t quelconque. Voir la figure 1.2.

E est une fonction strictement convexe de x . En effet,

$$E(x) = \frac{k}{2} (x - x_0)^2,$$

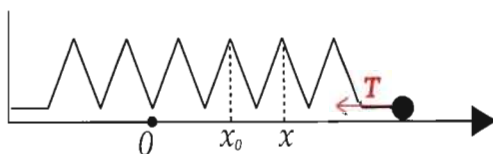


Figure 1.2 Un ressort.

implique

$$\frac{dE(x)}{dx} = k(x - x_0),$$

implique

$$\frac{d^2E(x)}{dx^2} = k > 0,$$

d'où E est strictement convexe.

$E(x)$ conduit à un équilibre stable en $x = x_0$ autour duquel le système oscille de façon harmonique. On cherche un nouveau potentiel $g(T)$ qui contient la même information que $E(x)$, T est la variable conjuguée de $E(x)$ c'est-à-dire "la force de rappel" de ce système élastique, elle est donnée par

$$T = -\frac{dE(x)}{dx}.$$

Pour y arriver, on a l'intérêt d'utiliser la transformée de Legendre. Soit g la transformée de Legendre de E pour la variable $-x$ alors,

$$\begin{aligned} g(T) &= \sup_{x \in \mathbb{R}} (-Tx - E(x)) \\ &= -Tx(T) - E(x(T)). \end{aligned}$$

On a :

$$\begin{aligned} T &= -\frac{dE}{dx}(x(T)) \\ &= -k(x(T) - x_0), \end{aligned}$$

implique

$$x(T) = -\frac{T}{k} + x_0.$$

Et de là, on obtient le potentiel recherché par simple changement de variable

$$\begin{aligned} g(T) &= -Tx(T) - E(x(T)) \\ &= -T \cdot \left(-\frac{T}{k} + x_0\right) - \frac{k}{2} \left(-\frac{T}{k} + x_0 - x_0\right)^2 \\ &= \frac{T^2}{2k} - Tx_0. \end{aligned}$$

Ce nouveau potentiel contient la même information que $E(x)$ car on n'a pas perdu l'information sur la position d'équilibre qui est en x_0 , en plus on peut en déduire x et E . En effet, par la transformation de Legendre inverse (transformée de Legendre de la fonction g pour la variable $-T$) :

$$\begin{aligned} E(x) &= \sup_{T \in \mathbb{R}} (-xT - g(T)), \\ &= -xT(x) - g(T(x)), \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} x &= -\frac{dg}{dT}(T(x)) \\ &= -\frac{d}{dT} \left(\frac{T^2(x)}{2k} - T(x)x_0 \right) \\ &= -\left(\frac{T(x)}{k} - x_0 \right), \end{aligned}$$

implique

$$T(x) = -k(x - x_0)$$

et par la transformation de Legendre inverse (transformée de Legendre de la fonction g pour la variable $-x$) :

$$\begin{aligned} E(x) &= \sup_{T \in \mathbb{R}} (-xT - g(T)), \\ &= -xT(x) - g(T(x)). \end{aligned}$$

Et de là on retrouve le potentiel élastique initial E :

$$\begin{aligned}
 E(x) &= -xT(x) - g(T(x)) \\
 &= \\
 &= xk(x - x_0) - \frac{T^2(x)}{2k} + T(x)x_0 \\
 &= xk(x - x_0) - \frac{k^2(x - x_0)^2}{2k} - k(x - x_0)x_0 \\
 &= k(x - x_0)^2 - \frac{k(x - x_0)^2}{2} \\
 &= \frac{k}{2}(x - x_0)^2.
 \end{aligned}$$

Intuitivement, on serait tenté d'inverser simplement $T = -\frac{dE(x)}{dx}$ pour obtenir $x(T)$ et l'introduire dans $E(x)$. On obtient alors le potentiel

$$\begin{aligned}
 E(T) &= \frac{k}{2} \left(-\frac{T}{k} + x_0 - x_0 \right)^2 \\
 &= \frac{k}{2} \frac{T^2}{k^2} \\
 &= \frac{T^2}{2k},
 \end{aligned}$$

qui est indépendante de x_0 . On a donc perdu l'information sur la position d'équilibre et la transformation de Legendre permet d'éviter ce type de problème.

Remarque 1.6

La transformation de Legendre n'est pas une transformation linéaire, i.e si $f_1(x)$ et $f_2(x)$ sont deux fonctions convexes alors $f_1(x) + f_2(x)$ est une fonction convexe (la somme de deux fonctions convexe est convexe), et on a, en général,

$$\mathcal{L}(f_1 + f_2) \neq \mathcal{L}(f_1) + \mathcal{L}(f_2). \quad (1.13)$$

Exemple 1.12

Soit $f_1(x) = x^2$, sa transformée de Legendre est la fonction $g_1(p) = p^2/4$ (d'après l'exemple 2.1) et soit $f_2(x) = x^2/2$, sa transformée de Legendre est la fonction

$g_2(p) = p^2/2$ (d'après l'exemple 2.2 en posant $m = 1$). On a :

$$\begin{aligned} g_1(p) + g_2(p) &= p^2/4 + p^2/2 \\ &= 3p^2/4. \end{aligned}$$

D'autre part soit la fonction $f(x) = f_1(x) + f_2(x) = x^2 + x^2/2 = 3x^2/2$, sa transformée de Legendre est la fonction $g(p) = p^2/3.2 = p^2/6$ (d'après l'exemple 2.2 en posant $m = 3$). $g_1(p) + g_2(p) = 3p^2/4 \neq g(p) = p^2/6$ implique

$$\mathcal{L}(f_1 + f_2) \neq \mathcal{L}(f_1) + \mathcal{L}(f_2),$$

d'où la transformation de Legendre n'est pas une transformation linéaire.

1.3 Inégalité de Young

On dit que f et g sont *duales* dans le sens de *Young* si $g(p) = \mathcal{L}(f)(p)$ et on sait d'après le théorème 2.1 que $f(p) = \mathcal{L}(g)(p)$. On a donc la proposition suivante :

Proposition 1.2 (Inégalité de Young)

Soient f et g deux fonctions convexes et duales dans le sens de Young, alors

$$px \leq f(x) + g(p). \quad (1.14)$$

Preuve

La preuve de cette proposition se base sur la définition car,

$$\begin{aligned} g(p) &= \mathcal{L}(f)(p) \\ &= \sup_{x \in \mathbb{R}} (px - f(x)) \\ &\geq px - f(x) \text{ pour tout } x \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Par conséquent,

$$g(p) + f(x) \geq px.$$

Ce résultat est très général et peut être utilisé pour montrer certaines estimations.

Exemple 1.13

Si $f(x) = x^2/2$, alors $g(p) = p^2/2$ d'après l'exemple 1.4 en posant $m = 1$. On a alors,

$$px \leq x^2/2 + p^2/2.$$

CHAPITRE II

TRANSFORMATION DE LEGENDRE EN THERMODYNAMIQUE

La thermodynamique a débuté au 18ème siècle par l'étude des propriétés des fluides parfaits à l'équilibre, en particulier des gaz. Les notions clés sont alors celles de grandeurs thermodynamiques, extensives ou intensives, reliées par une équation d'état. Notre objectif dans ce chapitre est d'obtenir, à partir de l'équation fondamentale de l'énergie interne, d'autres équations fondamentales avec d'autres variables. Nous l'obtiendrons par transformation de Legendre. Notons que la plupart des résultats énoncés dans ce chapitre proviennent de (Vauclair, 93), (Stauffer et Stanley, 98) et (Leroux, 04).

Grandeurs intensives et grandeurs extensives

-) Une *grandeur extensive*, associé à un système, est une grandeur proportionnelle à la quantité de matière contenue dans ce système c'est à dire additive et à valeur positive. Une grandeur est additive si sa valeur dans le système $\Sigma \cup \Sigma'$ est égale à la somme de ses valeurs dans le système Σ et Σ' à condition que Σ et Σ' soient disjoints et initialement en équilibre. Par exemples, la masse m , le volume V , l'enthalpie H , ... sont des grandeurs extensives.
-) Une *grandeur intensive* est une grandeur indépendante de la quantité de matière considérée. Elle est définie en chaque point d'un système. Par exemples, La pression p , la température T , ... sont des grandeurs intensives.

Variables d'état et fonctions d'état

Les *variables d'état* sont des grandeurs extensives, indépendantes, dont la connaissance suffit pour définir l'état macroscopique du système. Les grandeurs d'état non choisies comme variables d'état constituent les fonctions d'état, elles se déduisent des variables d'état par des équations d'état.

Définition 2.1 (Énergie)

Pour tout système fermé, on peut définir une fonction des variables d'état, extensive, appelée *énergie* E , qui est conservative, c'est-à-dire qui reste constante, en toutes circonstances, lorsque le système n'échange pas d'énergie avec le milieu extérieur.

Définition 2.2 (Fonction énergie interne)

L'énergie totale étant définie par la quantité qui est conservative dans toute évolution d'un système, on définit l'*énergie interne* par la grandeur U , intrinsèquement associée au système considéré telle que :

$$U = E - (E_c + E_p),$$

où E_c est l'énergie cinétique macroscopique et E_p est l'énergie potentielle associée aux forces extérieures. Notons que, pour les systèmes macroscopiquement au repos ($E_c = 0$) et non soumis à un champs extérieur ($E_p = 0$), l'énergie totale E se réduit à l'énergie interne U . Notons que l'énergie interne U , est une fonction convexe pour toutes les variables.

Définition 2.3 (Fonction entropie)

Pour tout système fermé, il existe une fonction d'état extensive, appelée *entropie* S , qui est non conservative. On cherche une fonction S des variables U, V, N qui satisfait la relation suivante :

$$S = S(U, V, N),$$

où U est l'énergie interne, V est le volume et N est le nombre de moles. Cette relation

s'appelle l'*équation fondamentale* de l'entropie.

L'équation fondamentale à l'entropie peut être inversée en :

$$U = U(S, V, N),$$

qui est l'équation fondamentale à l'énergie interne.

2.1 Équations fondamentales

Considérant $U(S, V, N)$ nous pouvons écrire :

$$dU = \frac{\partial U}{\partial S} dS + \frac{\partial U}{\partial V} dV + \frac{\partial U}{\partial N} dN,$$

ou encore, en introduisant une simple notation des dérivées partielles :

$$dU = TdS - pdV + \mu dN,$$

implique,

$$\begin{aligned} T(S, V, N) &= \frac{\partial U}{\partial S}(S, V, N), \quad p(S, V, N) = -\frac{\partial U}{\partial V}(S, V, N) \\ \text{et } \mu(S, V, N) &= \frac{\partial U}{\partial N}(S, V, N), \end{aligned}$$

on appelle μ le *potentiel chimique*, qui est de caractère intensif.

Par suite :

$$dS = \frac{1}{T} dU + \frac{p}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN,$$

implique,

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U}(U, V, N), \quad \frac{p}{T} = \frac{\partial S}{\partial V}(U, V, N), \quad \frac{\mu}{T} = \frac{\partial S}{\partial N}(U, V, N).$$

Ainsi les variables intensives T, p, μ peuvent être déterminées comme fonctions de variables extensives suivant que le système est décrit par l'une ou l'autre des deux équations

fondamentales à l'énergie interne ou à l'entropie :

$$\left\{ \begin{array}{l} T = T(U, V, N) \text{ ou } T = T(S, V, N) \\ p = p(U, V, N) \text{ ou } p = p(S, V, N) \\ \mu = \mu(U, V, N) \text{ ou } \mu = \mu(S, V, N) \end{array} \right.$$

De telles équations constituent, par définition, des équations d'état du système.

De $T = T(S, V, N)$ on déduit :

$$S = S(T, V, N).$$

2.2 Potentiels thermodynamiques

2.2.1 Fonction énergie libre

On appelle fonction *énergie libre* ou fonction de Helmholtz, du nom du physicien allemand H. Helmholtz, la fonction d'état F , des variables T, V, N , définie par la relation :

$$-F(T, V, N) = \sup_S (T.S - U(S, V, N)),$$

i.e. $-F$ est la transformée de Legendre de l'énergie U pour la variable S . Ainsi,

$$\begin{aligned} F(T, V, N) &= -\sup_S (T.S - U(S, V, N)) \\ &= -(T.S(T, V, N) - U(S(T, V, N), V, N)) \\ &= U(S(T, V, N), V, N) - T.S(T, V, N), \end{aligned}$$

où $S(T, V, N)$ représente la solution de l'équation

$$T = \frac{\partial U}{\partial S}(S(T, V, N), V, N).$$

De la relation :

$$dU = TdS - pdV + \mu dN,$$

on déduit immédiatement

$$\begin{aligned} dF &= dU - d(T.S) \\ &= -SdT - pdV + \mu dN, \end{aligned}$$

implique

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}(T, V, N), \quad p = -\frac{\partial F}{\partial V}(T, V, N), \quad \mu = \frac{\partial F}{\partial N}(T, V, N).$$

La transformation de Legendre étant involutive on a alors :

$$\begin{aligned} U(S, V, N) &= \sup_T (T.S + F(T, V, N)) \\ &= -S.T(S, V, N) + F(T(S, V, N), V, N) \end{aligned}$$

où $T(S, V, N)$ représente la solution de l'équation

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}(T(S, V, N), V, N).$$

2.2.2 Fonction enthalpie

Par définition, *l'enthalpie* H est une nouvelle fonction d'état extensive, des variables S , p , N et s'exprimant en joule, elle est définie par la relation suivante :

$$-H(S, p, N) = \sup_V (p.V - U(S, V, N)),$$

i.e. $-H$ est la transformée de Legendre de l'énergie U pour la variable V . Ainsi,

$$\begin{aligned} H(S, p, N) &= -\sup_V (p.V - U(S, V, N)) \\ &= p.V(S, p, N) + U(S, V(S, p, N), N), \end{aligned}$$

où $V(S, p, N)$ représente la solution de l'équation

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V}(S, V(S, p, N), N).$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
 dH &= dU + d(pV) \\
 &= dU + p dV + V dp \\
 &= T dS - p dV + \mu dN + p dV + V dp \\
 &= T dS + \mu dN + V dp,
 \end{aligned}$$

par conséquent,

$$T = \frac{\partial H}{\partial S}(S, p, N), \quad V = \frac{\partial H}{\partial p}(S, p, N) \quad \text{et} \quad \mu = \frac{\partial H}{\partial N}(S, p, N).$$

2.2.3 Fonction enthalpie libre

On appelle fonction *enthalpie libre* G , ou fonction de Gibbs, du nom du chimiste américain J. Gibbs, la fonction d'état des variables T, p, N , définie par la relation :

$$-G(T, p, N) = \sup_{S, V} (TS + pV - U(S, V, N)),$$

i.e. $-G$ est la transformée de Legendre de l'énergie U pour les variables S et V . Ainsi,

$$\begin{aligned}
 G(T, p, N) &= -\sup_{S, V} (TS + pV - U(S, V, N)) \\
 &= -T \cdot S(T, p, N) + p \cdot V(T, p, N) + U(S(T, p, N), V(T, p, N), N),
 \end{aligned}$$

où $V(T, p, N)$ et $S(T, p, N)$ représentent les solutions des équations suivantes :

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V}(S(T, p, N), V(T, p, N), N) \quad \text{et} \quad T = \frac{\partial U}{\partial S}(S(T, p, N), V(T, p, N), N).$$

On en déduit donc la différentielle dG de l'enthalpie libre

$$\begin{aligned}
dG &= d(-TS + pV + U) \\
&= dU - d(TS) + d(pV) \\
&= TdS - pdV + \mu dN - TdS - SdT + Vdp + pdV \\
&= \mu dN + Vdp - SdT,
\end{aligned}$$

par conséquent,

$$S = -\frac{\partial G}{\partial T}(T, p, N), \quad V = \frac{\partial G}{\partial p}(T, p, N) \quad \text{et} \quad \mu = \frac{\partial G}{\partial N}(T, p, N).$$

2.2.4 Fonction grand potentiel

On appelle fonction *grand potentiel* Ψ , la fonction d'état des variables T, V, μ , définie par la relation :

$$-\Psi(T, V, \mu) = \sup_{S, N} (TS + \mu N - U(S, V, N))$$

i.e. $-\Psi$ est la transformée de Legendre de l'énergie U pour les variables S et N . Ainsi,

$$\begin{aligned}
\Psi(T, V, \mu) &= -\sup_{S, N} (TS + \mu N - U(S, V, N)) \\
&= -T.S(T, V, \mu) - \mu.N(T, V, \mu) + U(S(T, V, \mu), V, N(T, V, \mu)),
\end{aligned}$$

où $N(T, V, \mu)$ et $S(T, V, \mu)$ représentent les solutions des équations suivantes :

$$\mu = \frac{\partial U}{\partial N}(S(T, V, \mu), V, N(T, V, \mu)) \quad \text{et} \quad T = \frac{\partial U}{\partial S}(S(T, V, \mu), V, N(T, V, \mu)).$$

On en déduit donc la différentielle $d\Psi$ de grand potentiel :

$$\begin{aligned}
d\Psi &= d(-TS - \mu N + U) \\
&= dU - d(TS) - d(\mu N) \\
&= TdS - pdV + \mu dN - TdS - SdT - \mu dN - Nd\mu \\
&= -pdV - SdT - Nd\mu,
\end{aligned}$$

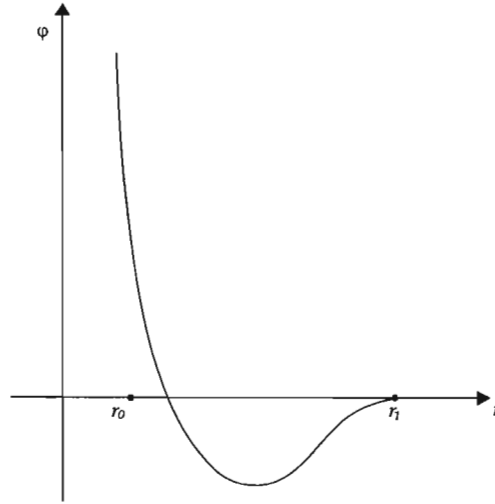


Figure 2.1 La fonction $\varphi(r)$

par conséquent,

$$S = -\frac{\partial \Psi}{\partial T}(T, V, \mu), \quad p = -\frac{\partial \Psi}{\partial V}(T, V, \mu), \quad N = -\frac{\partial \Psi}{\partial \mu}(T, V, \mu).$$

2.3 Fonction de partition et équation d'état pour un gaz imparfait

Considérons un gaz formé de N particules interagissant deux à deux à l'intérieur d'une région V de dimension 3 incluse dans \mathbb{R}^3 . Les positions des particules sont données par les vecteurs $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N$. Le *Hamiltonien* du système est défini par

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + u(\vec{x}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \varphi(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|),$$

où \vec{p}_i est le vecteur quantité de mouvement et $\frac{\vec{p}_i^2}{2m}$ est l'énergie cinétique de la $i^{\text{ème}}$ particule, $u(\vec{x}_i)$ est l'énergie potentielle à la position \vec{x}_i due aux forces extérieures, $|\vec{x}_i - \vec{x}_j| = r_{ij}$ est la distance entre les particules \vec{x}_i et \vec{x}_j . La fonction φ décrit l'interaction entre les molécules, comme le montre la figure 2.1.

La *fonction de partition* $Z(V, N, T)$ est définie par

$$Z(V, N, T) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int \exp(-\beta H) d\Gamma,$$

où h est la constante de Planck, $\beta = 1/kT$, T est la température en degrés Kelvin, k est la constante de Boltzmann et Γ l'espace d'état $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N$ de dimension $6N$. Afin de simplifier le calcul de la fonction de partition $Z(V, N, T)$ on suppose que l'énergie potentielle $u(\vec{x}_i)$ est négligeable ou nulle. De plus l'intégrale des énergies cinétiques se ramène à un produit d'intégrales Gaussiennes. Il s'ensuit que $Z(V, N, T)$ peut être donnée sous la forme

$$Z(V, N, T) = \frac{1}{N! \lambda^{3N}} \int_V \dots \int_V \exp \left(-\beta \sum_{i < j} \varphi(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) \right) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N,$$

où $\lambda = h(2\pi mkT)^{-\frac{1}{2}}$.

Mathématiquement, la fonction génératrice des fonctions de partition est appelée la *distribution grand-canonique*. On la note

$$Z_{gr}(V, T, z) = \sum_{n=0}^{\infty} Z(V, T, n) (\lambda^3 z)^n,$$

où la variable z est appelée la *fugacité* ou *l'activité*. Tous les paramètres macroscopiques du système peuvent être décrits en terme de cette fonction. Par exemple, la pression p , le nombre moyen de particules \bar{N} et la densité ρ sont définis par

$$pV = kT \log Z_{gr}(V, T, z), \quad \bar{N} = z \frac{\partial}{\partial z} \log Z_{gr}(V, T, z) \quad \text{et} \quad \rho = \frac{\bar{N}}{V}.$$

Exemple 2.1 (gaz parfait)

Un gaz parfait est un gaz idéal composé de N particules qui n'interagissent pas les unes avec les autres. La fonction φ décrit l'interaction entre les molécules est nulle, par

conséquent la fonction de partition devient

$$\begin{aligned}
 Z(V, N, T) &= \frac{1}{N! \lambda^{3N}} \int_V \dots \int_V \exp \left(-\beta \sum_{i < j} 0 (|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) \right) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \\
 &= \frac{1}{N! \lambda^{3N}} \int_V \dots \int_V \exp(0) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \\
 &= \frac{1}{N! \lambda^{3N}} \int_V \dots \int_V d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \\
 &= \frac{V^N}{N! \lambda^{3N}} \\
 &= \left(\frac{2\pi m}{h\beta} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{V^N}{N!} \\
 &= \left(\frac{2\pi m k T}{h} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{V^N}{N!}.
 \end{aligned}$$

ainsi,

$$\begin{aligned}
 Z_{gr}(V, T, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} Z(V, T, n) (\lambda^3 z)^n \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V^n}{n! \lambda^{3n}} (\lambda^3 z)^n \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(Vz)^n}{n!} \\
 &= \exp(Vz).
 \end{aligned}$$

Donc le nombre moyen de particules \bar{N} est

$$\begin{aligned}
 \bar{N} &= z \frac{\partial}{\partial z} \log Z_{gr}(V, T, z) \\
 &= z \frac{\partial}{\partial z} \log \exp(Vz) \\
 &= z \frac{\partial}{\partial z} (Vz) \\
 &= zV.
 \end{aligned}$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
 pV &= kT \log Z_{gr}(V, T, z) \\
 &= kT \log \exp(Vz) \\
 &= kTVz \\
 &= \bar{N}kT.
 \end{aligned}$$

Cette équation s'appelle : *équation d'état* d'un gaz parfait monoconstituants.

2.4 Fonction de partition et potentiels thermodynamiques

Certaines fonctions thermodynamiques peuvent s'exprimer simplement par rapport à la fonction de partition. Ainsi, par définition la fonction énergie interne est donnée par l'équation suivante

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \\
 &= -\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta}.
 \end{aligned}$$

Comme $\beta = \frac{1}{kT}$, on en déduit

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T},$$

ce qui permet d'écrire l'équation de la fonction énergie sous la forme

$$U = kT^2 \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T}.$$

Par définition la fonction entropie est donnée par la relation suivante

$$S = \frac{1}{T}U + k \ln(Z).$$

Ce qui implique

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{1}{T} k T^2 \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} + k \ln(Z) \\
 &= k T \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} + k \ln(Z) \\
 &= k \left(T \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} + \ln(Z) \right) \\
 &= k \frac{\partial (T \ln(Z))}{\partial T}.
 \end{aligned}$$

Par définition, la fonction énergie libre

$$F = U - TS,$$

peut être réécrite sous la forme

$$\begin{aligned}
 F &= U - T \left(\frac{1}{T} U + k \ln(Z) \right) \\
 &= -kT \ln(Z).
 \end{aligned}$$

Ainsi,

$$Z = \exp \left(-\frac{F}{kT} \right).$$

Ainsi, on trouve la pression

$$\begin{aligned}
 p &= -\frac{\partial F}{\partial V} \\
 &= kT \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V}.
 \end{aligned}$$

On en déduit donc la fonction enthalpie

$$\begin{aligned}
 H &= pV + U \\
 &= V k T \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} - k T^2 \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} \\
 &= k T \left(V \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} - T \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} \right) \\
 &= \frac{1}{\beta} \left(V \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} - T \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} \right).
 \end{aligned}$$

Nous obtenons de plus la fonction enthalpie libre

$$\begin{aligned}
 G &= U - TS + pV \\
 &= F + pV \\
 &= -kT \ln(Z) + V kT \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} \\
 &= kT \left(V \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} - \ln(Z) \right) \\
 &= \frac{1}{\beta} \left(V \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} - \ln(Z) \right).
 \end{aligned}$$

On a

$$F = -kT \ln(Z),$$

En différentiant cette équation, on obtient

$$dF = -d(kT \ln(Z)).$$

En évaluant le second membre

$$-d(kT \ln(Z)) = -k \left(\frac{\partial(T \ln(Z))}{\partial T} \right) dT - kT \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} \right) dV - kT \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right) dN,$$

et faisant appel à la relation connue

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN,$$

on retrouve la pression et l'entropie en identifiant terme à terme les deux expressions pour dF :

$$\begin{aligned}
 p &= kT \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V}, \text{ et} \\
 S &= k \frac{\partial(T \ln(Z))}{\partial T}.
 \end{aligned}$$

Nous obtenons de plus le potentiel chimique

$$\begin{aligned}
 \mu &= -kT \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right) \\
 &= -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right).
 \end{aligned}$$

On en déduit finalement la fonction grand potentiel

$$\begin{aligned}
 \Psi &= TS - \mu N + U \\
 &= T \left(\frac{1}{T} U + k \ln(Z) \right) + \frac{N}{\beta} \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right) + U \\
 &= 2U + kT \ln(Z) + \frac{N}{\beta} \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right) \\
 &= 2kT^2 \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} + kT \ln(Z) + kTN \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right) \\
 &= kT \left(2T \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} + \ln(Z) + N \frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right) \\
 &= \frac{1}{\beta} \left(2T \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} + \ln(Z) + N \frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right).
 \end{aligned}$$

Exemple 2.2 (cas d'un gaz parfait)

Prenons un gaz parfait composé de N particules, la fonction de partition Z est donnée par

$$Z = \left(\frac{2\pi m}{h\beta} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{V^N}{N!},$$

implique

$$\begin{aligned}
 \ln Z &= \ln \left(\left(\frac{2\pi m}{h\beta} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{V^N}{N!} \right) \\
 &= \ln \left(\left(\frac{2\pi m}{h\beta} \right)^{\frac{3N}{2}} \right) + \ln V^N - \ln N! \\
 &= \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h\beta} \right) + N \ln V - \ln N! \\
 &= \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3N}{2} \ln \beta + N \ln(V) - \ln N! \\
 &= N \left(\frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta + \ln V \right) - \ln N!.
 \end{aligned}$$

D'après la formule de Stirling on a l'estimé asymptotique

$$\ln N! \simeq N \ln(N) - N.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
 \ln Z &\simeq N \left(\frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta + \ln V \right) - N \ln(N) + N \\
 &= N \left(\frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta + \ln V - \ln N + 1 \right) \\
 &= N \left(\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta + 1 \right).
 \end{aligned}$$

À partir de l'expression de $\ln Z$, nous pouvons calculer toutes les quantités thermodynamiques d'un gaz parfait. En effet, soit U l'énergie interne d'un gaz parfait, alors

$$\begin{aligned}
 U &= - \frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} \\
 &= \frac{3}{2} \frac{N}{\beta} \\
 &= \frac{3}{2} N k T.
 \end{aligned}$$

On a aussi

$$\begin{aligned}
 p &= kT \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} \\
 &= \frac{NkT}{V},
 \end{aligned}$$

on retrouve donc l'équation d'état d'un gaz parfait

$$pV = NkT.$$

L'entropie d'un gaz parfait est donnée par :

$$\begin{aligned}
 S &= k \frac{\partial (T \ln(Z))}{\partial T} \\
 &= k \ln(Z) + kT \frac{\partial \ln(Z)}{\partial T} \\
 &\simeq kN \left(\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta + 1 \right) + kTN \left(\frac{3}{2} \frac{1}{T} \right) \\
 &= kN \left(\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta + \frac{5}{2} \right).
 \end{aligned}$$

Enfin, le potentiel chimique est donné par :

$$\begin{aligned}\mu &= -kT \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} \right) \\ &\simeq -kT \left(\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta + 1 \right) - kTN \left(-\frac{1}{N} \right) \\ &= -kT \left(\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h} \right) - \frac{3}{2} \ln \beta \right).\end{aligned}$$

2.5 Distribution grand-canonique et potentiels thermodynamiques

Certaines fonctions thermodynamiques peuvent s'exprimer simplement par rapport à la distribution grand canonique (voir page 34). Ainsi, par définition, la fonction entropie est donnée par l'équation suivante :

$$S = k \ln(Z_{gr}(V, T, z)) + \frac{U}{T} - \frac{\mu N}{T},$$

i.e.

$$U - TS - \mu N = -kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)).$$

Le membre de gauche n'est autre que le grand potentiel Ψ . Par conséquent

$$\Psi = -kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)).$$

On a que

$$S = -\frac{\partial \Psi}{\partial T}(T, V, \mu), \quad p = -\frac{\partial \Psi}{\partial V}(T, V, \mu), \quad N = -\frac{\partial \Psi}{\partial \mu}(T, V, \mu).$$

Ce qui implique

$$S = \frac{\partial(kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)))}{\partial T}, \quad p = kT \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial V}, \quad N = kT \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu},$$

qui permet de calculer l'énergie interne U . En effet,

$$U - TS - \mu N = -kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)),$$

entraîne que

$$\begin{aligned}
 U &= -kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)) + TS + \mu N \\
 &= -kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)) + T \frac{\partial(kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)))}{\partial T} + \mu kT \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu} \\
 &= kT^2 \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial T} + kT\mu \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu}.
 \end{aligned}$$

Ainsi, la fonction énergie libre prend la forme

$$\begin{aligned}
 F &= U - TS \\
 &= kT^2 \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial T} + kT\mu \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu} - T \frac{\partial(kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)))}{\partial T} \\
 &= kT\mu \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu} - kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)).
 \end{aligned}$$

La fonction enthalpie est donnée par

$$\begin{aligned}
 H &= pV + U \\
 &= kTV \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial V} + kT^2 \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial T} + kT\mu \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu}.
 \end{aligned}$$

Nous obtenons de plus la fonction enthalpie libre

$$\begin{aligned}
 G &= U - TS + pV \\
 &= kT^2 \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial T} + kT\mu \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu} - T \frac{\partial(kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)))}{\partial T} \\
 &\quad + V kT \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial V} \\
 &= kT\mu \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial \mu} + V kT \frac{\partial \ln(Z_{gr}(V, T, z))}{\partial V} - kT \ln(Z_{gr}(V, T, z)).
 \end{aligned}$$

CHAPITRE III

THÉORIE DES ESPÈCES ET GRAPHES IRRÉDUCTIBLES

Dans ce chapitre nous présentons les notions de théorie des espèces qui nous seront utiles pour l'application de la transformation de Legendre. Nous définissons les concepts d'espèce et de série formelles associées. On donne ensuite le théorème de dissymétrie pour les arbres et pour les graphes. Ensuite on définit des classes de graphes particuliers, comme les graphes connexes, inséparables (2-connexes) et irréductibles (2-arêtes connexes), ainsi que plusieurs relations fonctionnelles qui lient ces espèces entre elles. Notons qu'à moins d'avis contraire, la plupart des résultats énoncés dans ce chapitre proviennent de (Bergeron, Labelle et Leroux, 94).

3.1 Graphes simples, graphes connexes

Définition 3.1

Un *graphe simple* g est formé de deux ensembles : un ensemble fini non-vide U , appelé l'ensemble des sommets de g , et un ensemble A de paires de sommets, appelé l'ensemble des arêtes de g . On a donc $A \subseteq P_2(U)$. On écrit souvent $g = (U, A) = (U(g), A(g))$.

Soit $g = (U, A)$ un graphe simple et $x \in U$ un sommet. Le *degré* de x , dénoté $d(x)$, est le nombre d'arêtes de g incidentes à x , soit

$$d(x) = |\{a \in A \text{ tel que } x \in a\}| = |\{y \in U \text{ tel que } \{x, y\} \in A\}|.$$

Lorsque $d(x) = 0$, on dit que le sommet x est isolé.

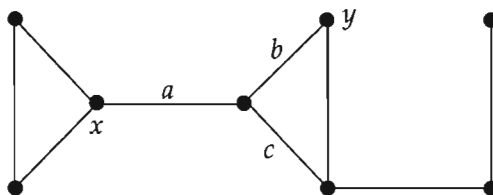


Figure 3.1 Un graphe simple connexe.

Dans un graphe simple $g = (U, A)$, une *chaîne* c est une séquence finie de sommets, x_0, x_1, \dots, x_m , telle que pour tout $0 \leq i < m$, $\{x_i, x_{i+1}\} \in A$. On écrit $c = [x_0, x_1, \dots, x_m]$. L'entier m s'appelle la longueur de la chaîne et on écrit $m = l(c)$. Les sommets x_0 et x_m sont appelés les extrémités initiale et finale de c , respectivement. Lorsque $x_0 = x_m$, on dit que la chaîne est fermée et on l'appelle un *cycle* en x_0 . Une *chaîne simple* est une chaîne sans répétition d'arête, et un *cycle simple* est une chaîne fermée simple.

Un graphe simple g est dit *connexe* si pour tout x, y , sommets de g , il existe une chaîne de x à y . On appelle *arbre* tout graphe simple connexe sans cycle simple.

Un *séparateur* d'un graphe simple connexe $g = (U, A)$ est un ensemble B d'arêtes tel que le graphe simple $(U, A - B)$ soit non-connexe, mais pour tout $b \in B$, $(U, A - (B - \{b\}))$ soit connexe. Si $\{a\}$ est un séparateur de g , alors l'arête a est appelée un *isthme* (ou un *pont*) de g .

Exemple 3.1

Soit g le graphe de la figure 3.1. Alors $\{b, c\}$ est un séparateur, $\{a, b\}$ ne l'est pas et l'arête a est un isthme.

3.2 Espèces

Définition 3.2

Une *espèce de structures* est un foncteur

$$F : \mathbb{B} \longrightarrow \mathbb{E},$$

où \mathbb{B} est la catégorie des ensembles finis et bijections, et \mathbb{E} est la catégorie des ensembles finis et fonctions.

Si U est un ensemble fini et $\sigma : U \longrightarrow V$ est une bijection, l'ensemble $F[U]$ est appelé l'ensemble des *F-structures* sur l'ensemble sous-jacent U et la fonction $F[\sigma] : F[U] \longrightarrow F[V]$ est appelée *fonction de transport* de *F-structures* le long de la bijection σ . Cette application doit satisfaire les conditions de fonctorialité suivantes :

a) pour toutes bijections $\sigma : U \longrightarrow V$ et $\tau : V \longrightarrow W$, on a

$$F[\tau \circ \sigma] = F[\tau] \circ F[\sigma],$$

b) pour la bijection identité $Id_U : U \longrightarrow U$, on a

$$F[Id_U] = Id_{F[U]}.$$

3.3 Séries formelles associées

Il y a trois séries principales associées à une espèce F .

1) La *série génératrice exponentielle* $F(x)$ associée à F , est la série formelle

$$F(x) = \sum_{n \geq 0} |F[n]| \frac{x^n}{n!}, \quad (3.1)$$

où $|F[n]|$ est le nombre de *F-structures* construites sur l'ensemble $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$.

2) La *série génératrice des types d'isomorphie* $\tilde{F}(x)$ associée à F , est la série formelle

$$\tilde{F}(x) = \sum_{n \geq 0} \tilde{F}_n x^n, \quad (3.2)$$

où \tilde{F}_n est le nombre de types d'isomorphie de *F-structures* d'ordre n .

3) La *série indicatrice des cycles* $Z_F(x_1, x_2, x_3, \dots)$ associée à F , est la série formelle

$$Z_F(x_1, x_2, x_3, \dots) = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} \text{fix} F[\sigma] x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} x_3^{\sigma_3} \dots, \quad (3.3)$$

où S_n désigne le groupe des permutations de $[n]$ (i.e. $S_n = S[n]$), $\text{fix} F[\sigma]$ est le nombre de F -structures sur $[n]$ laissées fixes par σ , et σ_j est le nombre de cycles de σ de longueur j .

Les opérations combinatoires définies sur les espèces de structures sont les suivantes : l'addition $(+)$, la multiplication (\cdot) , la substitution (\circ) , la dérivation $(')$, et le pointage (\bullet) . Ces opérations permettent de combiner entre elles des espèces de structures pour en produire d'autres. Voir (Bergeron, Labelle et Leroux, 94)

Un isomorphisme entre deux espèces de structures F et G ($F \simeq G$) est la donnée d'une famille de bijections $\alpha_U : F[U] \longrightarrow G[U]$ qui satisfait à la condition de naturalité suivante : pour toute bijection $\sigma : U \longrightarrow V$ entre ensembles finis, le diagramme suivant est commutatif

$$\begin{array}{ccc} F[U] & \xrightarrow{\alpha_U} & G[U] \\ F[\sigma] \downarrow & & \downarrow G[\sigma] \\ F[V] & \xrightarrow{\alpha_V} & G[V] \end{array} \quad (3.4)$$

Le concept d'isomorphisme est compatible avec le passage aux séries au sens où

$$F \simeq G \implies \begin{cases} F(x) = G(x), \\ \tilde{F}(x) = \tilde{G}(x), \\ Z_F(x_1, x_2, x_3, \dots) = Z_G(x_1, x_2, x_3, \dots). \end{cases} \quad (3.5)$$

Exemple 3.2

Puisque tout graphe simple sur un ensemble fini U est la réunion disjointe de graphes simples connexes, on a l'équation combinatoire suivante

$$\mathcal{G} = E(C),$$

où \mathcal{G} désigne l'espèce des graphes simples, C l'espèce des graphes connexes, et E l'espèce des ensembles. Voir la figure 3.2. Ainsi on a les relations suivantes :

$$\mathcal{G}(x) = \exp(C(x)),$$

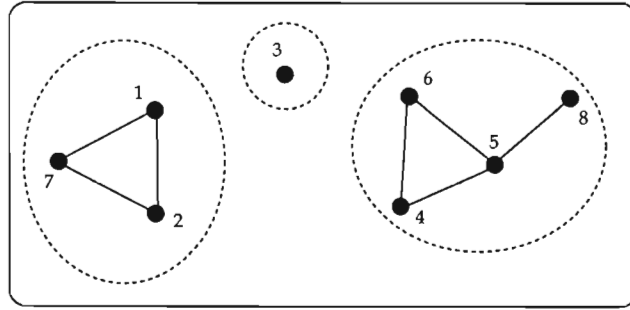


Figure 3.2 Un graphe simple g avec ses composantes connexes.

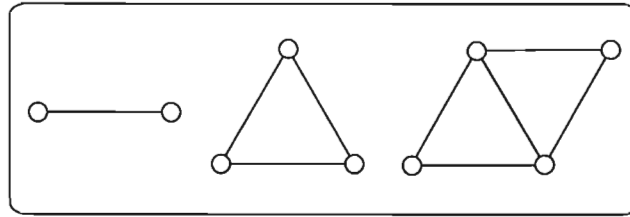


Figure 3.3 Trois exemples de graphes inséparables.

pour la série génératrice exponentielle, et

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}(x) &= Z_E\left(\tilde{C}(x), \tilde{C}(x^2), \dots\right) \\ &= \exp\left(\sum_{k \geq 1} \frac{1}{k} \tilde{C}(x^k)\right).\end{aligned}$$

pour la série génératrice des types d'isomorphie.

Un *point d'articulation* d'un graphe connexe est un sommet du graphe dont l'extraction fait perdre la connexité. Un graphe *inséparable* (ou encore *2-connexe*) est un graphe connexe sans point d'articulation (ce qui exclut le graphe réduit à un point).

Exemple 3.3

Dans le graphe simple de la figure 3.1, le sommet x est un point d'articulation mais y ne l'est pas. La figure 3.3 illustre trois types de graphes inséparables.

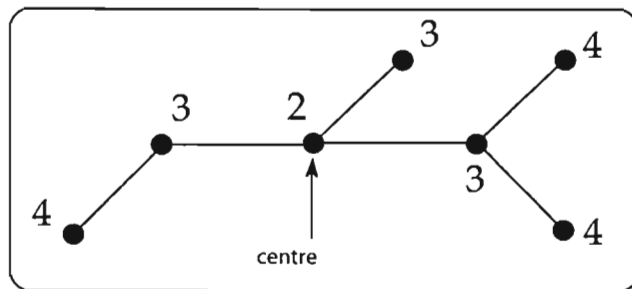


Figure 3.4 Un arbre.

Définition 3.3

Soit $a = (S, A)$ un arbre, avec S = ensemble de sommets et A = ensemble d'arête. L'*excentricité* d'un sommet $s \in S$ est la distance maximale de ce sommet à tout autre sommet de S . On note $e(s)$ l'excentricité de sommet s . on a alors

$$e(s) = \max_{t \in S} (d(s, t)).$$

Le centre de a est le sous arbre de a engendré par les sommets d'excentricité minimum. Il est facile de se convaincre que le centre d'un arbre est soit un sommet unique, soit une paire de sommets adjacents (une arête). Pour déterminer le centre d'un arbre, on procède par un effeuillage. Voir la figure 3.4.

Théorème 3.1 (Théorème de dissymétrie pour les arbres)

Soit a l'espèce des arbres, alors on a l'équation combinatoire suivante :

$$a^\bullet + a^- = a + a^{\bullet-}, \quad (3.6)$$

où les exposants \bullet , $-$, et $\bullet-$, désignent le pointage en un sommet, en une arête et en une arête ayant elle-même un de ses deux sommets adjacents distingué, respectivement.

Preuve

Le membre de gauche représente les arbres qui sont pointés soit en un sommet, soit en une arête. Dans le membre de droite, le terme a peut être identifié aux arbres qui ont

été pointés de manière canonique, en leur centre, que ce soit un sommet ou une arête. Il reste donc à trouver un isomorphisme naturel entre l'espèce des arbres pointés en un sommet ou en une arête, distincts du centre, et les arbres pointés en une arête ayant elle-même un de ses deux sommets adjacents distingué, représentés par le terme $a^{\bullet-}$.

1^{er} cas : L'arbre est pointé en un sommet s , distinct du centre. Soit a l'arête adjacente à s , en direction du centre. En distinguant s et a on obtient une $a^{\bullet-}$ -structure.

2^{ème} cas : L'arbre est pointé en une arête a , distincte du centre. Dans ce cas, soit s le sommet adjacent à l'arête distinguée en direction du centre. Alors on distingue s et a on obtient une $a^{\bullet-}$ -structure. Voir la figure 3.5.

Pour faire le chemin inverse, étant donnée une $a^{\bullet-}$ -structure. Soit s le sommet distingué adjacent à l'arête distinguée a . Si s est situé du côté du centre, alors on est dans le 2^{ème} cas et on distingue seulement a . Si s n'est pas situé du côté du centre, alors on est dans le 1^{er} cas et on distingue seulement s .

□

Remarque 3.1

Soit \mathcal{A} l'espèce des arborescences (arbres pointés en un sommet), alors $\mathcal{A} = a^{\bullet}$. Comme a^- représente les arbres qui sont pointés en une arête, les structures obtenues dans ce cas pouvant être identifiées à des paires d'arborescences, attachées aux extrémités de l'arête distinguée, alors $a^- = E_2(\mathcal{A})$, où E_2 désigne l'espèce des ensembles à deux éléments. De plus comme $a^{\bullet-}$ représente les arbres qui sont pointés en une arête ayant elle-même un de ses deux sommets adjacents distingué, en coupant l'arête distinguée, on obtient un couple d'arborescences, la première composante étant l'arborescence qui contient le sommet distingué, donc une \mathcal{A}^2 -structure. Par conséquent, la relation (3.6) peut être donnée sous la forme suivante :

$$\mathcal{A} + E_2(\mathcal{A}) = a + \mathcal{A}^2. \quad (3.7)$$

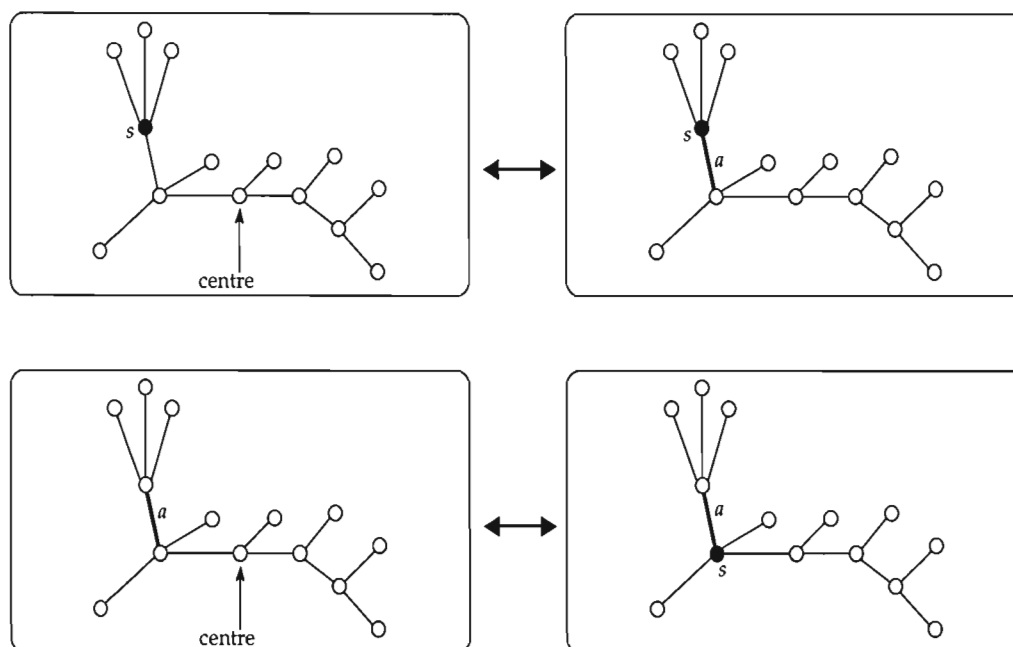


Figure 3.5 Théorème de dissymétrie pour les arbres.

Voir (Bergeron, Labelle et Leroux, 94).

3.4 Graphes inséparables (2-connexes)

Un *bloc* d'un graphe est un sous-graphe inséparable maximal. Les blocs d'un graphe g ne constituent pas une partition de ses sommets, plusieurs blocs pouvant être reliés entre eux par le même point d'articulation. Le bc-arbre, $bc(g)$, d'un graphe connexe g est un arbre bicoloré (blanc-noir) décrivant précisément les liens entre les blocs de g (les sommets blancs de $bc(g)$) et les points d'articulations de g (les sommets noirs de $bc(g)$). Les lettres "bc" viennent de l'anglais *block-cutpoint tree*. Le *b-graphe* (anglais : *block-graph*) d'un graphe connexe g est un nouveau graphe connexe dont les sommets sont les blocs de g et les arêtes sont les points d'articulation entre les blocs de g . Voir la figure 3.6. Le bc-centre d'un graphe g est le centre de $bc(g)$. Il est facile de voir que le bc-centre d'un graphe est soit un sommet, soit un bloc.

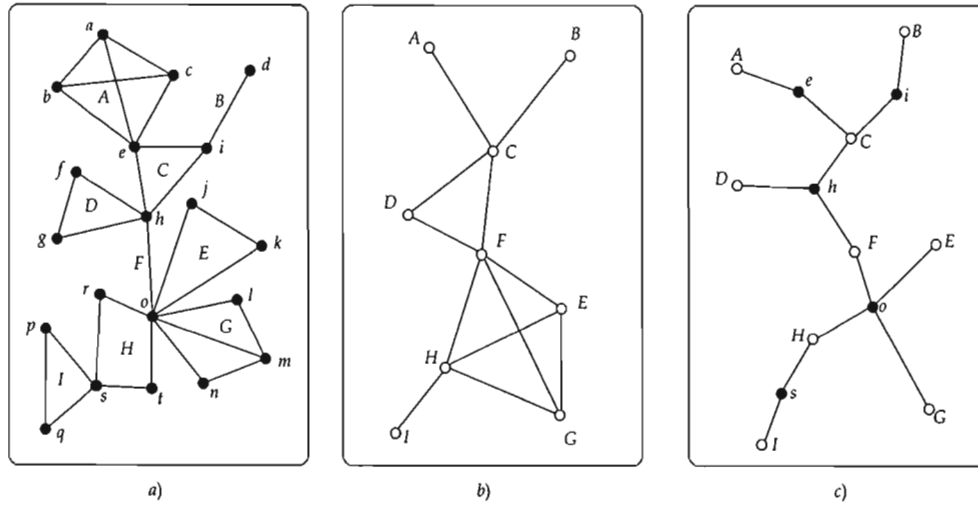


Figure 3.6 a) Un graphe connexe g , b) le b-graphe de g , c) le bc-arbre $bc(g)$.

Soit B une espèce de graphes 2-connexes. Dénotons par C_B l'espèce des graphes connexes dont tous les blocs sont dans B , appelés C_B -graphes. Par exemples, si $B = B_a$, la famille de tous les blocs (la lettre a vient de l'anglais "all") alors $C_B = C$, l'espèce de tous les graphes connexes; si $B = K_2$, le graphe complet à deux sommets (la classe de tels graphes), alors $C_B = a$, l'espèce des arbres et si $B = K_3$, le graphe complet à trois sommets, alors C_B est l'espèce des cactus triangulaires, i.e des graphes connexes dont tous les blocs sont des triangles.

Soit C_B^\bullet l'espèce des C_B -graphes connexes pointés en un sommet. C'_B note la dérivée de C_B . Notons que C_B^\bullet et C'_B sont reliées par l'équation combinatoire suivante :

$$C_B^\bullet = X \cdot C'_B, \quad (3.8)$$

où X désigne l'espèce des singletons.

Rappelons qu'en général, si F est une espèce de structures, alors l'espèce F^\bullet (appelée F point) et F' (la dérivée de F) sont reliées par l'équation combinatoire suivante :

$$F^\bullet = X \cdot F'. \quad (3.9)$$

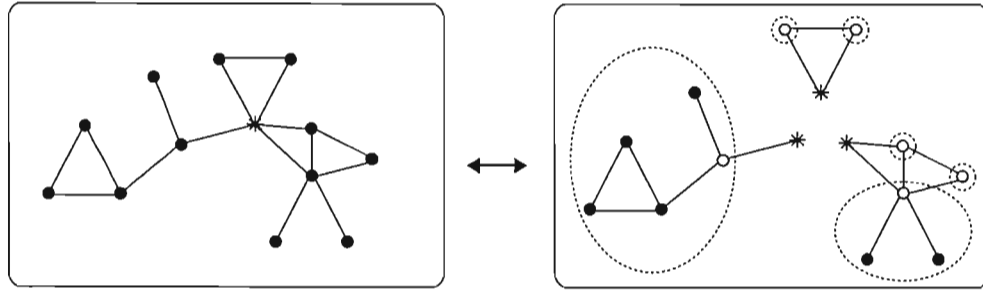


Figure 3.7 $C'_B = E(B'(C_B^\bullet))$.

Proposition 3.1

Soit B une classe de graphes inséparables et C_B , l'espèce des graphes connexes dont tous les blocs sont dans B . Alors on a

$$C'_B = E(B'(C_B^\bullet)), \quad (3.10)$$

où E dénote l'espèce des ensembles.

Preuve

Etant donné un graphe $g \in C_B[U + \{*\}]$, considérons les blocs b auxquels le sommet $*$ appartient. Les autres sommets de ces blocs sont les racines de C_B^\bullet -structures. Cette décomposition canonique donne bien un ensemble de $B'(C_B^\bullet)$ -structures. Voir la figure 3.7, où ici, B est la classe de graphes inséparables illustrés à la figure 3.3.

Si, on multiplie par X , on trouve

$$C_B^\bullet = X \cdot C'_B = X \cdot E(B'(C_B^\bullet)), \quad (3.11)$$

et, pour la série génératrice exponentielle on trouve

$$C_B^\bullet(x) = x \cdot \exp(B'(C_B^\bullet(x))).$$

Exemple 3.4

i) Si $B = K_2$, alors $C_B = a$, l'espèce des arbres et $C_B^\bullet = a^\bullet$, l'espèce des arborescences. Dans ce cas, puisque $B' = X$, l'équation (3.11) redonne la relation fondamentale bien connue pour l'espèce des arborescences

$$a^\bullet = X E(a^\bullet). \quad (3.12)$$

ii) Soit $B = B_a$ l'espèce de tous les graphes 2-connexes. On a alors $C_B = C$, et ainsi la relation suivante

$$C^\bullet = X \cdot E(B'_a(C^\bullet)).$$

Théorème 3.2 (théorème de dissymétrie pour les graphes)

Soit B , une espèce de graphes inséparables, et C_B , l'espèce des graphes connexes dont tous les blocs sont dans B . Alors on a

$$C_B^\bullet + C_B^\diamond = C_B + C_B^{\blacklozenge}, \quad (3.13)$$

où les exposants \bullet , \diamond , et \blacklozenge , désignent le pointage en un sommet, en un bloc et en un bloc ayant lui-même un de ses sommets adjacents distingué, respectivement.

Preuve

Ce théorème généralise le théorème de dissymétrie pour les arbres et la démonstration est semblable. Le membre de gauche représente les graphes dans C_B qui sont pointés soit en un sommet (C_B^\bullet), soit en un bloc (C_B^\diamond). Dans le membre de droite, le terme C_B correspond au cas où le pointage a été fait de façon canonique, dans le bc-centre du graphe. Dans les autres cas, une bijection naturelle, entre les graphes pointés en un sommet ou en un bloc (hors du bc-centre), et les graphes pointés en un bloc ayant lui-même un de ses sommets distingué, obtenue en regardant en direction du centre, est illustrée à la figure 3.8, où ici B est la classe de graphes inséparables illustrés à la figure 3.3.

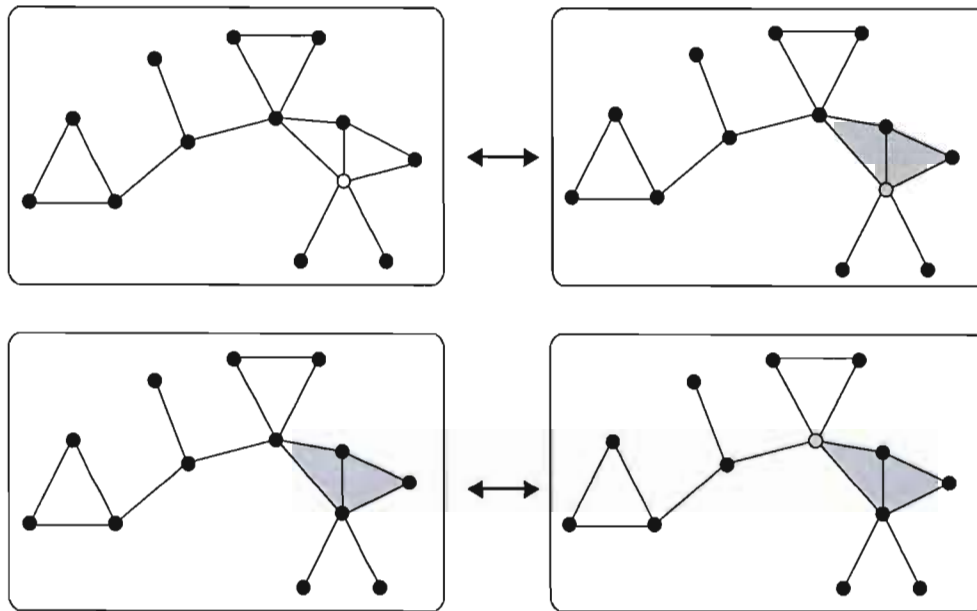


Figure 3.8 Théorème de dissymétrie pour les graphes.

□

Remarque 3.2

L'équation (3.13), peut être donnée sous la forme suivante

$$C_B^\bullet + B(C_B^\bullet) = C_B + C_B^\bullet \cdot B'(C_B^\bullet). \quad (3.14)$$

Voir (Bergeron, Labelle et Leroux, 94).

Exemple 3.5

Pour $B = B_a$ l'espèce de tous les graphes 2-connexes. On a alors $C_B = C$ et on a la relation suivante

$$C = (X + B_a - X \cdot B'_a)(C^\bullet).$$

En effet, d'après la remarque 3.2 on a

$$C_B = C_B^\bullet + B(C_B^\bullet) - C_B^\bullet \cdot B'(C_B^\bullet),$$

En remplaçant B par B_a , on trouve

$$\begin{aligned} C &= C^\bullet + B_a(C^\bullet) - C^\bullet \cdot B'_a(C^\bullet) \\ &= X(C^\bullet) + B_a(C^\bullet) - X(C^\bullet) \cdot B'_a(C^\bullet) \text{ car } X(C^\bullet) = C^\bullet \\ &= (X + B_a - X \cdot B'_a)(C^\bullet). \end{aligned}$$

Rappelons qu'une espèce de structures F satisfait la propriété suivante :

$$F \circ X = X \circ F = F. \quad (3.15)$$

Soit N_B l'espèce des graphes connexes contenant au moins deux sommets et dont aucun bloc pendant (i.e. de degré 1 dans le bc-arbre) ou isolé n'appartient à B , i.e. si $g \in N_B$ alors $bc(g)$ ne contient aucune feuille de type bloc $\in B$. Par exemple, si $B = K_2$ alors N_B est l'espèce des graphes connexes non réduits à un point et sans sommets pendants (i.e. de degré 1), et si $B = B_a$ l'espèce de tous les graphes 2-connexes, alors $N_B = 0$.

Proposition 3.2

Soit B une espèce de graphes 2-connexes. Alors

$$C = C_B + N_B(C_B^\bullet). \quad (3.16)$$

Preuve

Soit g un graphe dans la classe $C - C_B$, i.e. g est un graphe dont les blocs ne sont pas tous dans B . On lui associe de façon canonique un sous-graphe h , appartenant à la classe N_B , à partir du bc-arbre $bc(g)$. Le sous-graphe h est caractérisé par le fait que $bc(h)$ est le sous bc-arbre maximal de $bc(g)$ ne contenant aucune feuille de type bloc $\in B$. On retrouve le graphe g en remplaçant les sommets de h par les C_B^\bullet -structures qui lui sont

attachées dans g . Voir la figure 3.9. Dans cette illustration, B est la classe de graphes inséparables illustrés à la figure 3.3, les sommets rouges dans $bc(g)$ et $bc(h)$ représentent les blocs de g qui ne sont pas dans B .

3.5 Graphes irréductibles

Définition 3.4

Un *isthme* (ou *pont*, anglais : *bridge*) d'un graphe g est un bloc de g appartenant à K_2 , i.e. une arête de g dont la suppression augmente le nombre de composantes connexes. Un graphe *irréductible* est un graphe connexe sans isthme (on parle aussi de graphe 2-arête-connexe). Une *motte* (anglais : *lump*) est un sous-graphe irréductible maximal d'un graphe. Voir la figure 3.10

Soit M , une espèce de graphes irréductibles. Notons C_M l'espèce des graphes connexes dont toutes les mottes sont dans M . Par exemple, si $M = X$, l'espèce des singletons, alors $C_M = a$, l'espèce des arbres, et si $M = M_a$, l'espèce de tous les graphes irréductibles, alors $C_M = C$, l'espèce des graphes connexes. Le *im-arbre* d'un C_M -graphe g est un arbre dont les sommets sont les mottes de g et les arêtes sont les isthmes qui lient ces mottes entre elles. Le *im-centre* d'un C_M -graphe est le centre du im-arbre correspondant. Il est facile de voir que le im-centre d'un C_M -graphe est soit une motte, soit un isthme. Pour déterminer le im-centre d'un C_M -graphe, on procède par un effeuillage du im-arbre correspondant.

Proposition 3.3

Soit M , une espèce de graphes irréductibles. Alors on a

$$C_M^\bullet = M^\bullet(X \cdot E(C_M^\bullet)), \quad (3.17)$$

où E dénote l'espèce des ensembles.

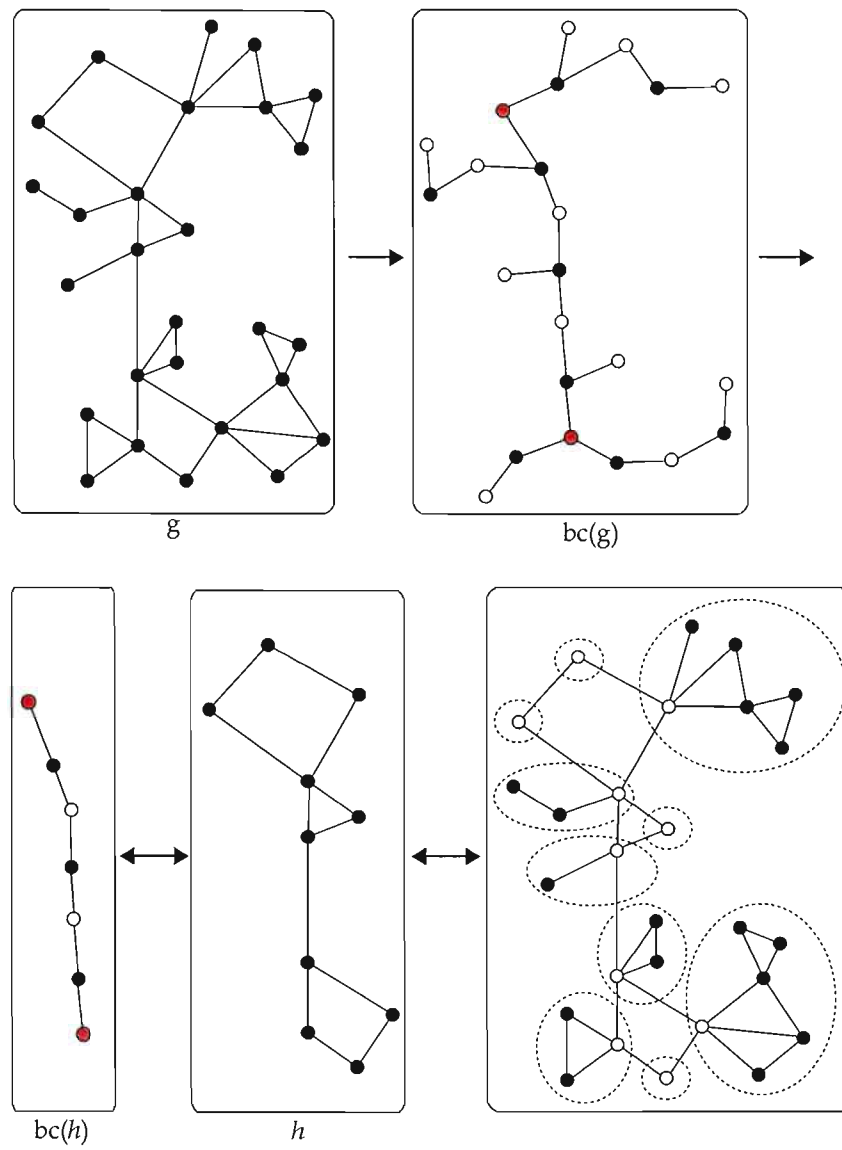


Figure 3.9 $C - C_B = N_B(C_B^\bullet)$.

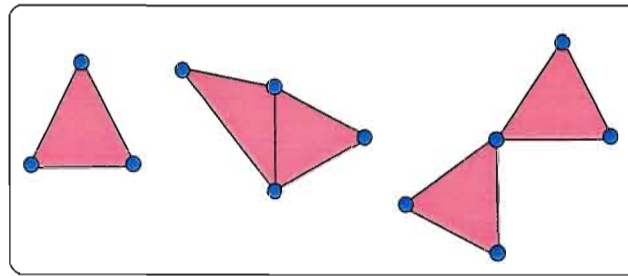


Figure 3.10 Trois exemples de graphes irréductibles.

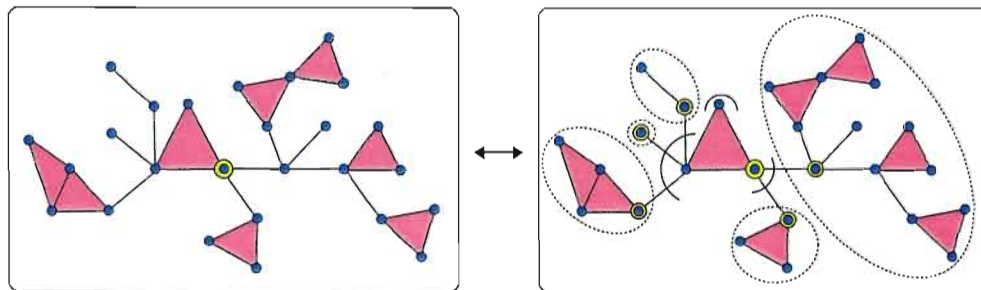


Figure 3.11 $C_M^\bullet = M^\bullet(X \cdot E(C_M^\bullet))$.

Preuve

Étant donné un graphe $g \in C_M^\bullet$, considérons la motte à laquelle le sommet pointé appartient. Les autres sommets liés à cette motte par des isthmes sont les racines de C_M^\bullet -structures. Voir la figure 3.11. \square

Proposition 3.4 (Version pondérée de la proposition 3.3)

Soit M , une espèce de graphes irréductibles, et $C_{M,b}$ est l'espèce C_M , pondérée par un compteur d'isthmes b . Alors

$$C_{M,b}^\bullet(X) = M^\bullet(X \cdot E(bC_{M,b}^\bullet(X))), \quad (3.18)$$

Preuve

Étant donné un graphe $g \in C_{M,b}^\bullet$, considérons la motte à laquelle le sommet pointé appartient. Les autres sommets liés à cette motte par des isthmes sont les racines de

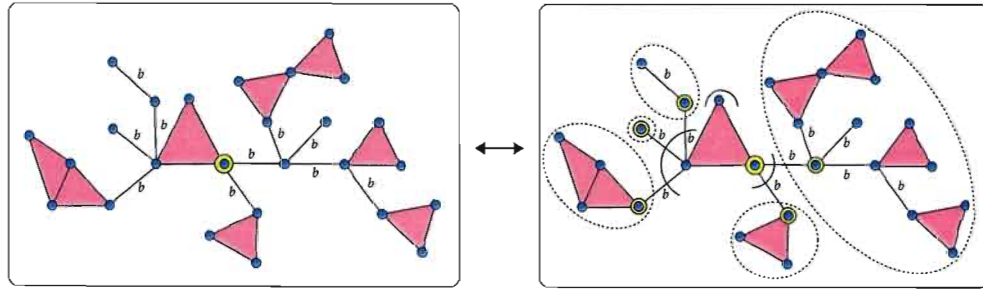


Figure 3.12 $C_{M,b}^\bullet(X) = M^\bullet \left(X \cdot E \left(bC_{M,b}^\bullet(X) \right) \right)$.

$C_{M,b}^\bullet$ -structures. Voir la figure 3.12. □

Proposition 3.5 (théorème de dissymétrie pour les C_M -graphes)

Soit M , une espèce de graphes irréductibles, et C_M , l'espèce des graphes connexes dont toutes les mottes sont dans M . Alors on a

$$C_M^i + C_M^m = C_M + C_M^{im}, \quad (3.19)$$

où les exposants i , m , et im , désignent le pointage en un isthme, en une motte et en une paire incidente isthme-motte, respectivement.

Preuve

Le membre de gauche représente les graphes dans C_M qui sont pointés soit en un isthme, soit en une motte. Dans le membre de droite, le terme C_M peut être identifié aux graphes dans C_M qui ont été pointés de manière canonique, dans le im-centre du graphe. Il est clair que le im-centre est soit un isthme ou une motte. Dans les autres cas, une bijection naturelle, entre les graphes dans C_M pointés en un isthme ou en une motte (hors du im-centre) et les graphes dans C_M pointés en une paire isthme-motte, obtenue en regardant en direction du centre, est illustrée à la figure 3.13.

Remarque 3.3

L'équation (3.19), peut être donnée sous la forme suivante

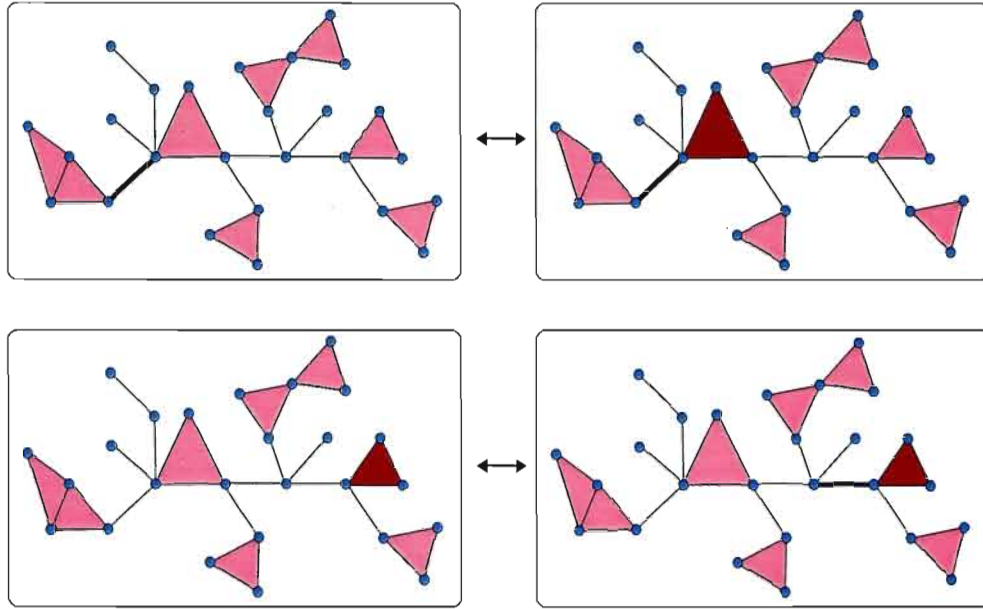


Figure 3.13 Théorème de dissymétrie pour les C_M -graphes.

$$E_2(C_M^\bullet) + M(X \cdot E(C_M^\bullet)) = C_M + (C_M^\bullet)^2, \quad (3.20)$$

où E_2 désigne l'espèce des ensembles à deux éléments. Voir (Pierre Leroux, 2003).

Proposition 3.6 (Version pondérée de la proposition 3.5)

Soit M , une espèce de graphes irréductibles, et $C_{M,b}$ est l'espèce C_M , pondérée par un compteur d'isthmes b . Alors on a

$$C_{M,b}^i + C_{M,b}^m = C_{M,b} + C_{M,b}^{\text{im}}, \quad (3.21)$$

Preuve

La démonstration de cette proposition est très semblable à celle de la proposition (3.5), la seule différence est qu'on ajoute un poids b sur les isthmes.

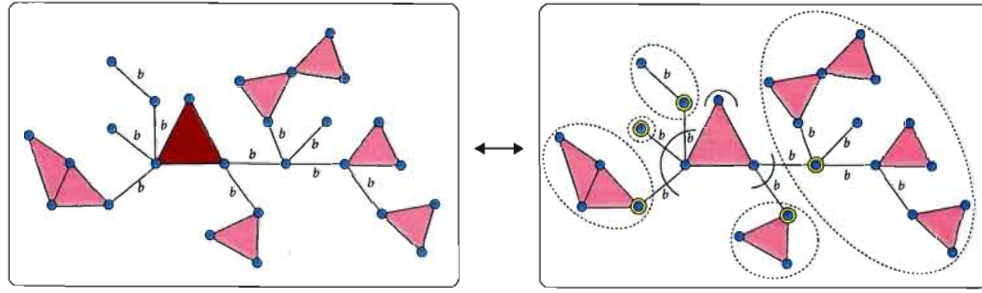


Figure 3.14 $C_{M,b}^m = M \left(X \cdot E \left(bC_{M,b}^\bullet \right) \right)$.

Remarque 3.4

L'équation (3.21), peut être donnée sous la forme suivante

$$bE_2 \left(C_{M,b}^\bullet \right) + M \left(X \cdot E \left(bC_{M,b}^\bullet \right) \right) = C_{M,b} + b \left(C_{M,b}^\bullet \right)^2. \quad (3.22)$$

En effet, $C_{M,b}^i$ représente les graphes dans $C_{M,b}$ qui sont pointés en un isthme. En coupant l'isthme distingué on obtient un ensemble de deux graphes dans $C_{M,b}^\bullet$ et un poids b de l'isthme détaché, d'où le terme $bE_2 \left(C_{M,b}^\bullet \right)$. le terme $C_{M,b}^m$ représente les graphes dans $C_{M,b}$ qui sont pointés en une motte, les structures obtenues pouvant être identifiées à des graphes dans $M \left(X \cdot E \left(bC_{M,b}^\bullet \right) \right)$. Voir la figure 3.14.

Le terme $C_{M,b}^{im}$, représente les graphes dans $C_{M,b}$ qui ont été pointés en une paire isthme-motte, en regardant en direction du centre. En coupant l'isthme distingué on obtient une $\left(C_{M,b}^\bullet \right)^2$ -structure et un poids b de l'isthme détaché, d'où le terme $b \left(C_{M,b}^\bullet \right)^2$. Voir la figure 3.15.

Considérons l'espèce à deux sortes $M(XE(Z))$. Un graphe $g \in M(XE(Z))$ est un M -graphe sur un ensemble de sommets, les éléments de sorte X , auxquels sont attachés un nombre quelconque de sommets de sorte Z , appelés *pieds* (anglais : "*legs*"). Voir la figure 3.16.

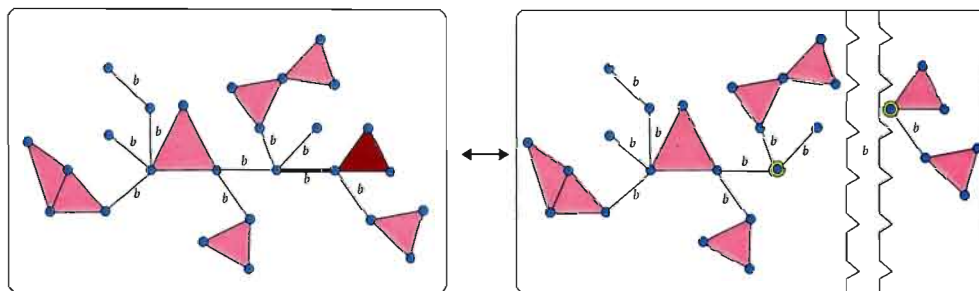


Figure 3.15 $C_{M,b}^{im} = b \left(C_{M,b}^{\bullet} \right)^2$.

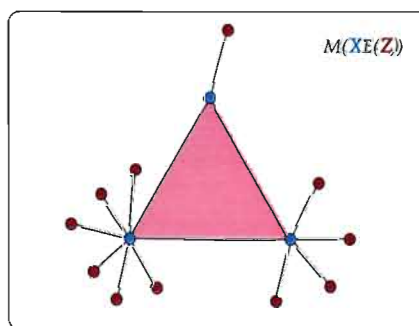


Figure 3.16 Un M -graphe avec "pieds".

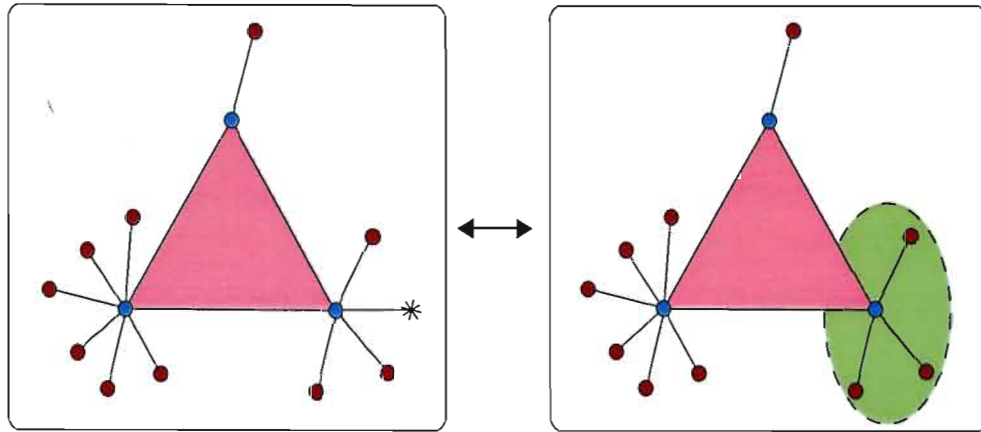


Figure 3.17 $\frac{\partial}{\partial Z} M(XE(Z)) = M^\bullet(XE(Z))$.

On a alors

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial Z} M(XE(Z)) &= XE(Z) M'(XE(Z)) \\ &= M^\bullet(XE(Z)). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Voir la figure 3.17.

Définition 3.5

Soit $V_M(X, Z)$, l'espèce virtuelle pondérée à deux sortes, définie par

$$V_M(X, Z) = aE_2(Z) - M(XE(Z)). \quad (3.24)$$

Le terme $aE_2(Z)$ peut être identifié à deux pieds attachées par une arête de poids a . Ici a est une variable formelle.

Alors, on a, par (3.23)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial Z} V_M(X, Z) &= \frac{\partial}{\partial Z} (aE_2(Z) - M(XE(Z))) \\ &= aZ - M^\bullet(XE(Z)). \end{aligned} \quad (3.25)$$

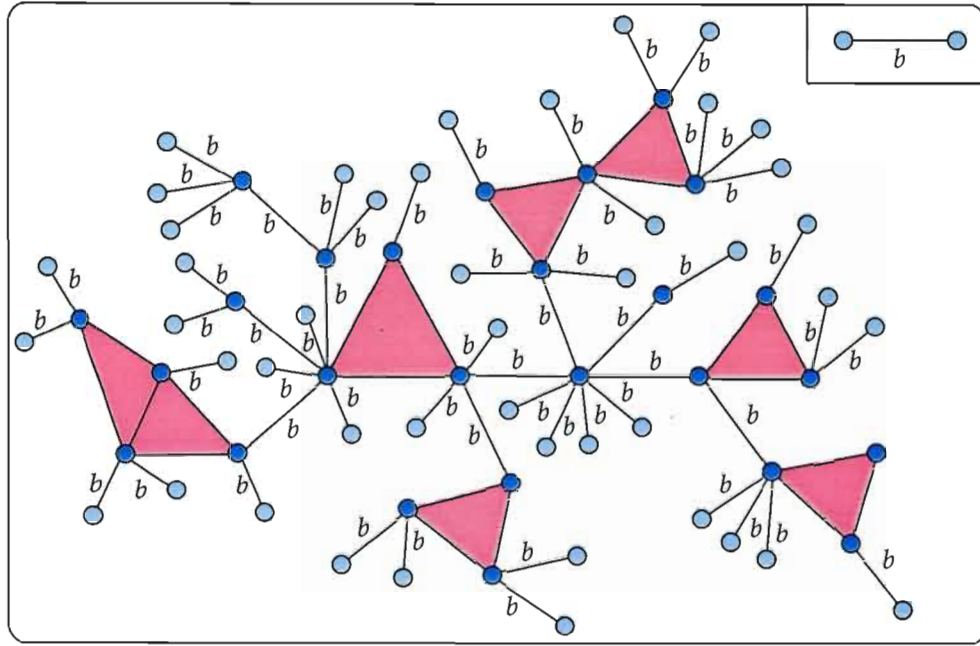


Figure 3.18 $\mathcal{G}_M(X, T) = bE_2(T) + C_{M,b}(XE(bT))$.

Définition 3.6

Soit $\mathcal{G}_M(X, T) = \mathcal{G}_{M,b}(X, T)$ l'espèce de structures pondérée à deux sortes définie par

$$\mathcal{G}_M(X, T) = bE_2(T) + C_{M,b}(XE(bT)), \quad (3.26)$$

où T dénote la sorte des "pieds" et $C_{M,b}(XE(bT))$ est l'espèce des graphes connexes dont toutes les mottes sont dans M , sur des sommets de sorte X auxquels sont attachés des pieds de sorte T , pondérée par un compteur d'isthmes b .

Par convention une $bE_2(T)$ -structure peut être identifiée à deux pieds attachés par une arête (un isthme) de poids b . Voir la figure 3.18.

Noter que

$$\frac{\partial}{\partial T} C_{M,b}(XE(bT)) = bC_{M,b}^\bullet(XE(bT)). \quad (3.27)$$

Définition 3.7

Soit $\mathcal{A}_M(X, T) = \mathcal{A}_{M,b}(X, T)$, l'espèce de structures pondérée à deux sortes définie par

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_M(X, T) &= \frac{\partial}{\partial T} \mathcal{G}_M(X, T) \\
 &= \frac{\partial}{\partial T} (bE_2(T) + C_{M,b}(XE(bT))) \\
 &= bT + bC_{M,b}^\bullet(XE(bT)).
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Un $\mathcal{A}_M(X, T)$ -graphe peut être identifié à un \mathcal{G}_M -graphe *planté* avec un demi isthme de poids b .

Proposition 3.7

L'espèce $Y = \mathcal{A}_M(X, T)$, satisfait l'équation fonctionnelle suivante

$$Y = bT + bM^\bullet(XE(Y)). \tag{3.29}$$

Preuve

Cette relation est une conséquence immédiate de la formule (3.18) de la proposition 3.4.

En effet,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_M(X, T) &= bT + bC_{M,b}^\bullet(XE(bT)) \\
 &= bT + bC_{M,b}^\bullet(X)|_{X:=XE(bT)} \\
 &= bT + bM^\bullet(XE(bT) \cdot E(bC_{M,b}^\bullet(XE(bT)))) \\
 &= bT + bM^\bullet(X \cdot E(bT + bC_{M,b}^\bullet(XE(bT)))) \\
 &= bT + bM^\bullet(XE(\mathcal{A}_M(X, T))).
 \end{aligned}$$

Cette équation peut être démontrée aussi par une argumentation graphique. Voir la figure 3.19.

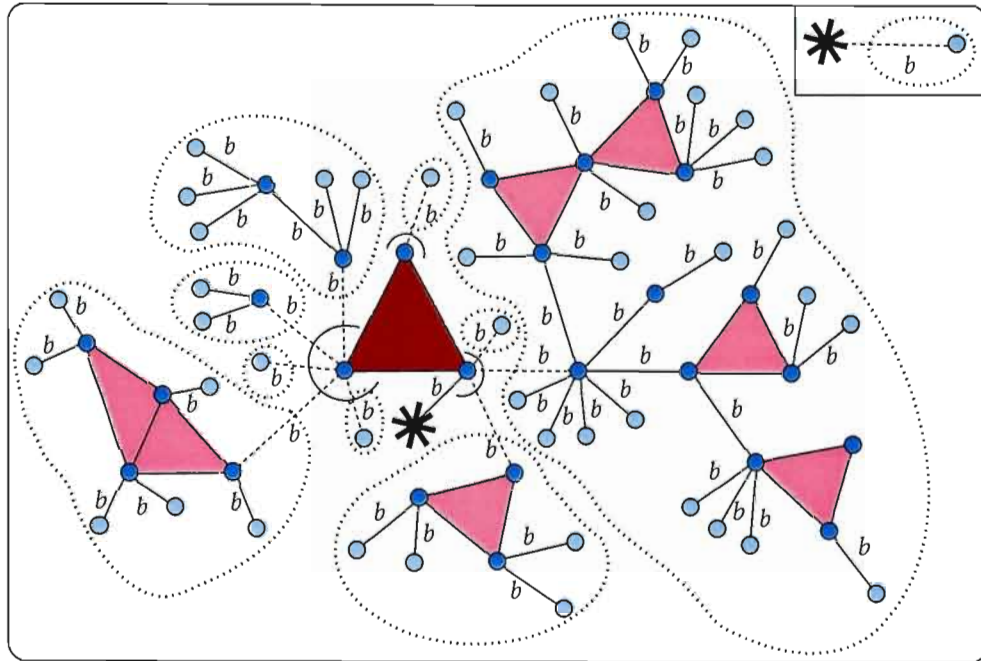


Figure 3.19 $\mathcal{A}_M(X, T) = bT + bM^*(XE(\mathcal{A}_M(X, T)))$.

Proposition 3.8 (théorème de dissymétrie pour les \mathcal{G}_M -graphes)

Soit M une espèce de graphes irréductibles et soit $\mathcal{G}_M(X, T)$, l'espèce de structures définie par (3.26), c'est-à-dire

$$\mathcal{G}_M(X, T) = bE_2(T) + C_{M,b}(XE(bT)). \quad (3.30)$$

Alors on a

$$\mathcal{G}_M^i(X, T) + \mathcal{G}_M^m(X, T) = \mathcal{G}_M(X, T) + \mathcal{G}_M^{im}(X, T), \quad (3.31)$$

où les exposants i , m , et im , désignent le pointage en un isthme, en une motte et en une paire incidente isthme-motte, respectivement.

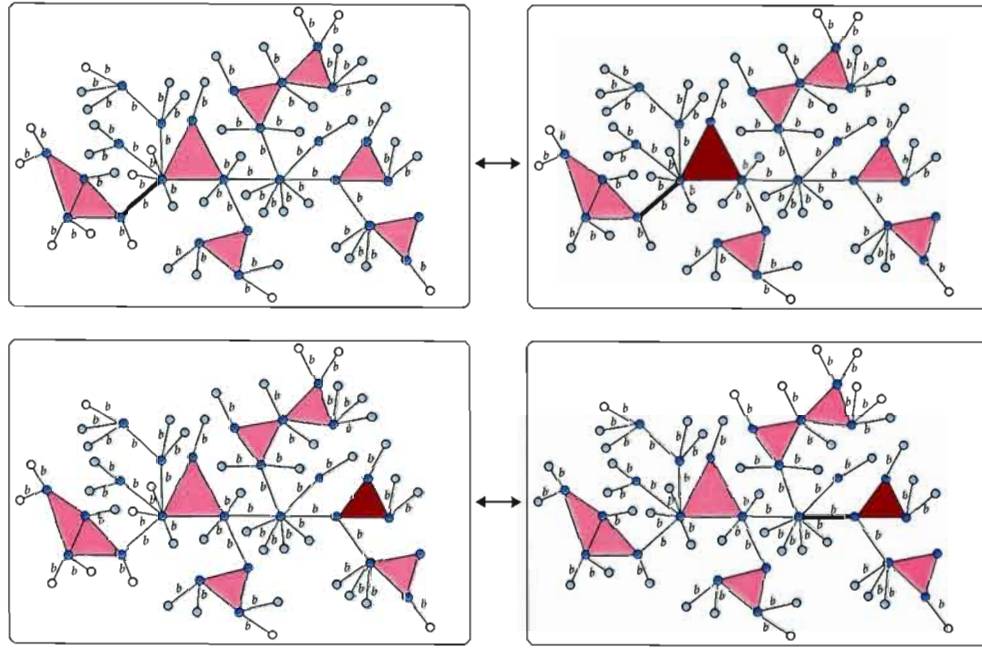


Figure 3.20 Théorème de dissymétrie pour les C_M -graphes avec pieds.

Preuve

La démonstration de ce résultat est très semblable à celle du théorème de dissymétrie pour les C_M -graphes. Notons que les sommets de sorte Z ne sont pas des mottes. Voir la figure 3.20.

Remarque 3.5

L'équation (3.31) peut être donnée sous la forme suivante

$$\frac{1}{b}E_2(\mathcal{A}_M) + M(XE(\mathcal{A}_M)) = \mathcal{G}_M(X, T) + \frac{1}{b}\mathcal{A}_M(\mathcal{A}_M - bT), \quad (3.32)$$

où $\mathcal{A}_M = \mathcal{A}_M(X, T)$. En effet, $\mathcal{G}_M^i(X, T)$ représente les graphes dans $\mathcal{G}_M(X, T)$ qui sont pointés en un isthme. En coupant l'isthme distingué on obtient un ensemble de deux graphes dans $\mathcal{A}_M(X, T)$ dont chacun a un demi isthme de poids b , d'où le terme $\frac{1}{b}E_2(\mathcal{A}_M)$ (on multiplie par $1/b$ pour rétablir le poids total). $\mathcal{G}_M^m(X, T)$ représente les

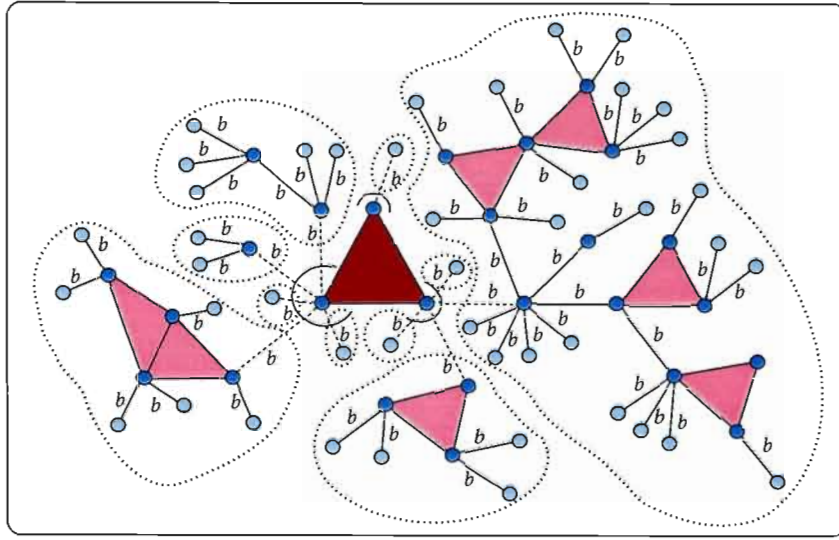


Figure 3.21 $\mathcal{G}_M^m(X, T) = M(XE(\mathcal{A}_M))$.

graphes dans $\mathcal{G}_M(X, T)$ qui sont pointés en une motte, les structures obtenues pouvant être identifiées à des graphes dans $M(XE(\mathcal{A}_M))$. Voir la figure 3.21.

Le terme $\mathcal{G}_M^{\text{im}}(X, T)$, représente les graphes dans $\mathcal{G}_M(X, T)$ qui ont été pointés en une paire isthme-motte. En coupant l'isthme distingué on obtient une $(\mathcal{A}_M - bT)$ -structure du côté de la motte distinguée, et une \mathcal{A}_M -structure de l'autre côté, d'où le terme $\frac{1}{b}\mathcal{A}_M(\mathcal{A}_M - bT)$ (on multiplie par $1/b$ pour rétablir le poids total). Voir la figure 3.22.

3.6 Compléments sur l'inversion des espèces de structures

Proposition 3.9

Soit F , une espèce virtuelle (en particulier, une espèce de structures) dont la décomposition canonique est de la forme suivante

$$F = X + F_2 + F_3 + \dots \quad (F_0 = 0, F_1 = X).$$

Alors il existe une unique espèce virtuelle $F^{(-1)}$ telle que

$$F^{(-1)} \circ F = F \circ F^{(-1)} = X.$$

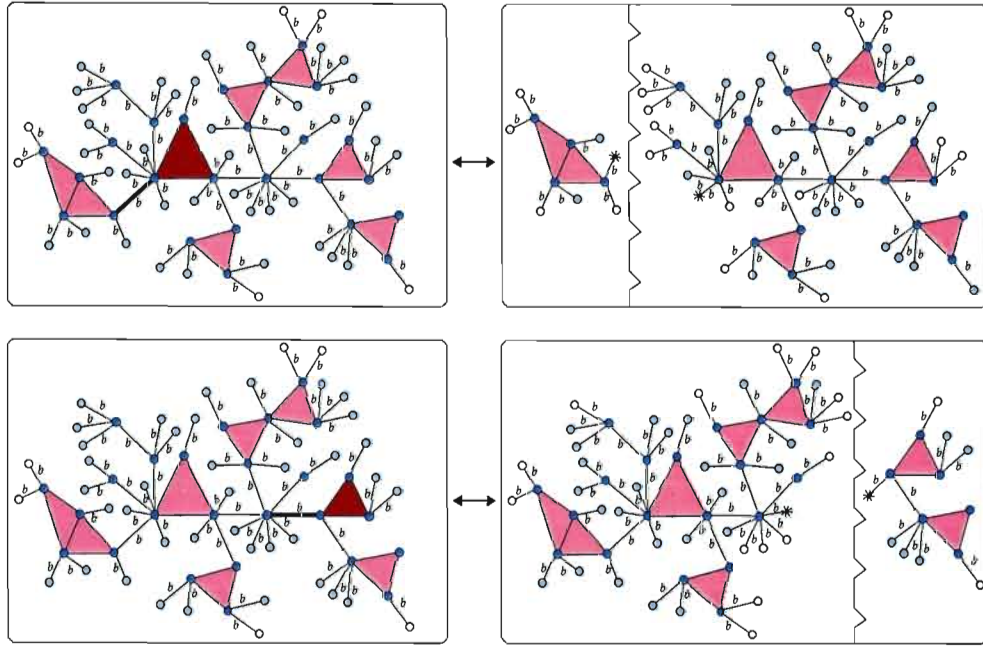


Figure 3.22 $\mathcal{G}_M^{\text{im}}(X, T) = \frac{1}{b} \mathcal{A}_M (\mathcal{A}_M - bT)$.

Voir chapitre 2, section 2.5 de (Bergeron, Labelle et Leroux, 94,).

Théorème 3.3 (Théorème des espèces implicites)

Soit $H(X, Y)$ une espèce à deux sortes satisfaisant aux conditions suivantes :

$$H(0, 0) = 0 \text{ et } \frac{\partial H}{\partial Y}(0, 0) = 0. \quad (3.33)$$

Alors l'équation combinatoire $A = H(X, A)$ caractérise, à isomorphisme canonique près, une unique espèce virtuelle $A = A(X)$ pour laquelle $A(0) = 0$.

Ce théorème est dû à Joyal (Joyal, 81).

En particulier, on dénote $Y = {}_G A$ l'espèce des G -arborescences qui est définie par l'équation fonctionnelle suivante :

$$Y = X + G(Y). \quad (3.34)$$

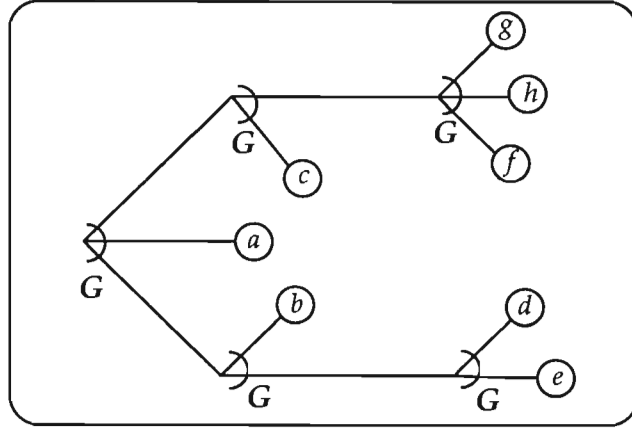


Figure 3.23 Une G -arborescence.

Par itération de l'équation (3.34), on voit apparaître des G -arborescences qui sont des structures arborescentes, en ce que les sommets internes ne sont pas étiquetés, i.e. que l'ensemble sous-jacent se retrouve aux feuilles de l'arborescence. Voir la figure 3.23. Ici l'ensemble sous-jacent est $U = \{a, b, c, d, e, f, g, h\}$.

Posons $H(X, Y) = X + G(Y)$, alors les conditions (3.33) se traduisent par

$$G(0) = 0 \text{ et } G'(0) = 0.$$

Notons que pour toute série formelle $F(x)$, on a

$$F(GA(x)) = F(x) + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx} \right)^{k-1} \left(F'(x) G^k(x) \right),$$

et également

$$F(GA(x)) = \sum_{k \geq 0} \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx} \right)^k \left(F(x) (1 - G'(x)) G^k(x) \right).$$

Voir (Bergeron, Labelle et Leroux, 94).

Dans le cas où on peut écrire $G(Y) = Y \cdot D(Y)$, où D est une espèce de structures, l'équation (3.34) se ramène à

$$Y = X \cdot R(Y), \tag{3.35}$$

avec $R = L(D)$, (L est l'espèce des listes) et les formules d'inversion de Lagrange peuvent être utilisées. Noter qu'au niveau des séries formelles, sous les conditions (3.33), il est toujours possible d'écrire

$$G(y) = yD(y),$$

avec $D(y) \in \mathbb{A}[[y]]$ ($\mathbb{A}[[y]]$ est l'anneau des séries formelles dont les coefficients sont dans l'anneau \mathbb{A}), et d'utiliser l'inversion de Lagrange dans (3.35), avec

$$R(y) = (1 - D(y))^{-1}.$$

CHAPITRE IV

TRANSFORMATION DE LEGENDRE EN THÉORIE DES ESPÈCES

Dans ce chapitre, nous donnons le résultat principal de ce travail qui est la transformation de Legendre d'une espèce de structures à une sorte ou à deux sortes. Nous montrons que l'espèce $\mathcal{G}_M(X, T)$ est la transformation de Legendre de l'espèce $V_M(X, Z)$ par rapport à Z . Finalement, par une construction originale, nous montrons que l'espèce M utilisée dans la définition de l'espèce $\mathcal{G}_M(X, T)$ peut être remplacée par une espèce N quelconque, avec $N[0] = 0$. Notons que mis à part la section 4.5, la plupart des résultats énoncés dans ce chapitre proviennent de l'exposé de Pierre Leroux au séminaire Lotharingien de combinatoire à Bertinoro (Leroux, 03).

4.1 Transformation de Legendre d'une espèce à une sorte

Soit $V(Z)$ une espèce de structures telle que

$$V(0) = 0, \quad \frac{\partial V}{\partial Z}(0) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2}(0) \neq 0. \quad (4.1)$$

Par analogie avec la remarque 1.3, on définit la transformée de Legendre $F(T)$ de l'espèce $V(Z)$ par rapport à Z :

$$F(T) = (TZ - V(Z))|_{Z=A(T)}, \quad (4.2)$$

où $Z = A(T)$ est une espèce qui représente la solution de l'équation

$$T = \frac{\partial V}{\partial Z}(Z). \quad (4.3)$$

Notons que les conditions (4.1) et la proposition (3.9) assurent l'existence d'une unique espèce $A(T)$ solution de l'équation (4.3).

L'équation (4.2), donne alors

$$F(T) = T \cdot A(T) - V(A(T)). \quad (4.4)$$

Remarque 4.1

On a

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T}(T) &= \frac{\partial}{\partial T}(T \cdot A(T) - V(A(T))) \\ &= A(T) + T \cdot \frac{\partial}{\partial T}A(T) - \frac{\partial V}{\partial Z}(A(T)) \cdot \frac{\partial A}{\partial T}(T) \\ &= A(T) + T \cdot \frac{\partial}{\partial T}A(T) - T \frac{\partial}{\partial T}A(T) \\ &= A(T). \end{aligned}$$

Proposition 4.1

La transformation de Legendre des espèces de structures à une sorte est involutive. C'est-à-dire, si l'espèce F est la transformée de Legendre de l'espèce V alors l'espèce V est la transformée de Legendre de l'espèce F .

Preuve

Soit $F(T)$ la transformée de Legendre de l'espèce $V(Z)$ par rapport à Z telle que

$$F(0) = 0, \frac{\partial F}{\partial Z}(0) = 0 \text{ et } \frac{\partial^2 F}{\partial Z^2}(0) \neq 0.$$

Nous devons montrer que $V(Z)$ est la transformée de Legendre de $F(T)$ par rapport à T . Soit $W(Z)$ la transformée de Legendre de $F(T)$ par rapport à T .

On doit avoir

$$W(Z) = (ZT - F(T))|_{T=B(Z)},$$

où $T = B(Z)$, satisfait l'équation

$$Z = \frac{\partial F}{\partial T}(T).$$

Or,

$$\frac{\partial F}{\partial T}(T) = A(T).$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} B(Z) &= A^{(-1)}(T) \\ &= \frac{\partial V}{\partial Z}(Z). \end{aligned}$$

De (4.4) on tire

$$\begin{aligned} V(Z) &= B(Z) \cdot Z - F(B(Z)) \\ &= W(Z). \end{aligned}$$

4.2 Transformation de Legendre d'une espèce à deux sortes par rapport à une sorte

Soit $V(X, Z)$ une espèce de structures à deux sortes telle que

$$\frac{\partial V}{\partial Z}(X, 0) = 0 \text{ et } \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2}(X, 0) \neq 0. \quad (4.5)$$

Noter que la sorte X joue un rôle de figurant.

La transformée de Legendre de $V(X, Z)$ par rapport à Z est l'espèce à deux sortes $F(X, T)$ définie par

$$F(X, T) = (TZ - V(X, Z))|_{Z=A(X, T)}, \quad (4.6)$$

où $Z = A(X, T)$ est une espèce à deux sortes qui représente la solution de l'équation

$$T = \frac{\partial V}{\partial Z}(X, Z). \quad (4.7)$$

Notons que les conditions (4.5) et la proposition (3.9) assurent l'existence d'une unique espèce $A(X, T)$ solution de l'équation (4.7).

L'équation (4.6) se ramène à

$$F(X, T) = T \cdot A(X, T) - V(X, A(X, T)). \quad (4.8)$$

Remarque 4.2

On a

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T}(X, T) &= \frac{\partial}{\partial T}(T \cdot A(X, T) - V(X, A(X, T))) \\ &= A(X, T) + T \cdot \frac{\partial}{\partial T}A(X, T) - \frac{\partial V}{\partial Z}(X, A(X, T)) \cdot \frac{\partial}{\partial T}A(X, T) \\ &= A(X, T) + T \cdot \frac{\partial}{\partial T}A(X, T) - T \frac{\partial}{\partial T}A(X, T) \\ &= A(X, T). \end{aligned}$$

Proposition 4.2

La transformation de Legendre des espèces de structures à deux sortes par rapport à une sorte est involutive.

Preuve

La preuve de cette proposition est semblable à celle de la proposition 4.1.

4.3 Transformation de Legendre de l'espèce $V_M(X, Z)$

Soit M une classe de graphes irréductibles et soit $V_M(X, Z) = V_{M,a}(X, Z)$ l'espèce pondérée définie par

$$V_M(X, Z) = aZ^2 - aE_2(Z) - M(XE(Z)). \quad (4.9)$$

Pour des raisons techniques, on a remplacé $aE_2(Z)$ par $aZ^2 - aE_2(Z)$ dans l'équation (3.25). Ces deux espèces, $aE_2(Z)$ et $aZ^2 - aE_2(Z)$, ont la même série génératrice exponentielle, $\frac{a}{2}z^2$, et la même dérivée partielle par rapport à Z , aZ .

On a

$$\frac{\partial}{\partial Z} V_M(X, Z) = aZ - M^\bullet(XE(Z)),$$

et l'équation (4.7) s'écrit

$$\begin{aligned} T &= \frac{\partial V_M}{\partial Z}(X, Z) \\ &= aZ - M^\bullet(XE(Z)), \end{aligned} \tag{4.10}$$

ce qui implique

$$Z = \frac{1}{a}T + \frac{1}{a}M^\bullet(XE(Z)). \tag{4.11}$$

À partir du théorème des espèces implicites (théorème 3.3), on en déduit que cette équation possède une unique solution $Z = A(X, T)$ qui est donnée par $Z = \mathcal{A}_M(X, T) = \mathcal{A}_{M,b}(X, T)$, avec $b = 1/a$. Voir la proposition 3.7.

Théorème 4.1

Soit M une classe de graphes irréductibles, et supposons que $ab = 1$. Alors la transformée de Legendre $F(X, T)$ de $V_M(X, Z)$ par rapport à Z , est donnée par l'espèce $\mathcal{G}_M(X, T) = \mathcal{G}_{M,b}(X, T)$, définie par l'équation

$$\mathcal{G}_M(X, T) = bE_2(T) + C_{M,b}(XE(bT)).$$

Preuve

Nous devons montrer que $F(X, T) = \mathcal{G}_M(X, T)$. Or, d'après (4.8) et le théorème de dissymétrie pour les \mathcal{G}_M -graphes (remarque 3.5) et posant $\mathcal{A}_M = \mathcal{A}_M(X, T)$, on en

déduit que

$$\begin{aligned}
F(X, T) &= T\mathcal{A}_M(X, T) - V_M(X, \mathcal{A}_M(X, T)) \\
&= T\mathcal{A}_M - V_M(X, \mathcal{A}_M) \\
&= T\mathcal{A}_M - (a\mathcal{A}_M^2 - aE_2(\mathcal{A}_M) - M(XE(\mathcal{A}_M))) \\
&= aE_2(\mathcal{A}_M) + M(XE(\mathcal{A}_M)) - a\mathcal{A}_M^2 + \mathcal{A}_MT \\
&= aE_2(\mathcal{A}_M) + M(XE(\mathcal{A}_M)) - a\mathcal{A}_M \left(\mathcal{A}_M - \frac{1}{a}T \right) \\
&= \frac{1}{b}E_2(\mathcal{A}_M) + M(XE(\mathcal{A}_M)) - \frac{1}{b}\mathcal{A}_M(\mathcal{A}_M - bT) \\
&= \mathcal{G}_M(X, T).
\end{aligned}$$

Ceci complète la preuve.

□

4.3.1 Exemple : $M = X$, la classe des graphes à un sommet

Soit $M = X$, l'espèce des singletons, alors comme on l'a remarqué à la section 3.4, $C_M = a$, l'espèce des arbres. Dans ce cas $C_M^\bullet = a^\bullet$ est l'espèce des arborecences, satisfaisant $a^\bullet = X \cdot E(a^\bullet)$.

De plus

$$V_M(X, Z) = aZ^2 - aE_2(Z) - X \cdot E(Z), \quad (4.12)$$

et

$$\frac{\partial V_M}{\partial Z}(X, Z) = aZ - XE(Z). \quad (4.13)$$

Notons

$$a_b(X, T) = \mathcal{G}_M(X, T) = bE_2(T) + a(XE(bT)), \quad (4.14)$$

l'espèce des arbres dont les sommets internes sont de sorte X et les feuilles sont de sorte X ou de sorte T , pondérée par un compteur d'arêtes b .

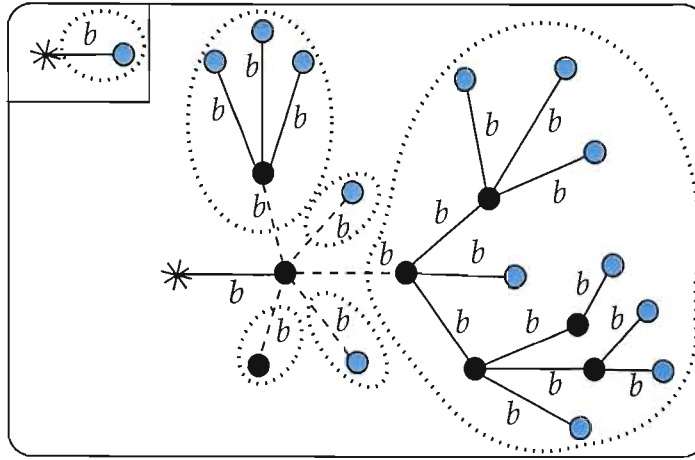


Figure 4.1 $\mathcal{A}_M(X, T) = bT + bXE(\mathcal{A}_M(X, T))$.

Ainsi, on a

$$\mathcal{A}_M(X, T) = \frac{\partial a_b}{\partial T}(X, T) \quad (4.15)$$

$$= bT + ba^\bullet(XE(bT)). \quad (4.16)$$

où $\mathcal{A}_M(X, T)$ est l'espèce des arborescences dont les sommets internes sont de sorte X et les feuilles sont de sorte T , pondérée par un compteur d'arêtes b .

Notons que l'espèce $\mathcal{A}_M(X, T)$ est plantée, i.e. avec une demi arête de poids b . Alors

$$\mathcal{A}_M(X, T) = bT + bXE(\mathcal{A}_M(X, T)). \quad (4.17)$$

Voir la figure 4.1.

On en déduit donc que les espèces $a_b(X, T)$ et $V_M(X, Z)$ donnée par (4.12), sont telles que l'une est la transformée de Legendre de l'autre.

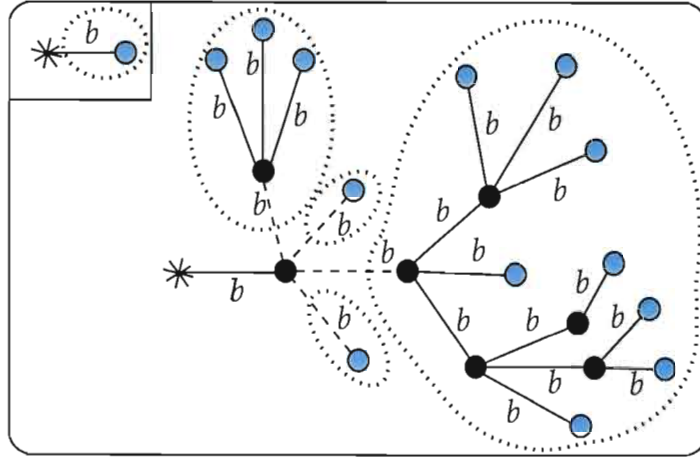


Figure 4.2 $A(X, T) = bT + bX E_{\geq 1}(A(X, T))$.

4.4 Transformation de Legendre de l'espèce $B(X, Z)$

Soit $\alpha(X, T) = \alpha_b(X, T)$ l'espèce des arbres dont les sommets internes sont de sorte X et les feuilles sont de sorte T , pondérées par un compteur d'arêtes b , telle que pour chaque sommet interne de sorte X est attachée au moins une feuille de sorte T . On a,

$$\alpha(X, T) = bE_2(T) + XE_{\geq 2}(bT) + bE_2(XE_{\geq 1}(bT)) + b^2E_3(XE_{\geq 1}(bT)) + \dots, \quad (4.18)$$

et

$$\frac{\partial \alpha}{\partial T}(X, T) = A(X, T),$$

où $A(X, T)$ est l'espèce des arborescences dont les sommets internes sont de sorte X et les feuilles sont de sorte T , pondérée par un compteur d'arêtes b .

Notons que l'espèce $A(X, T)$ est plantée, i.e. avec une demi arête de poids b . Et

$$A(X, T) = bT + bX E_{\geq 1}(A(X, T)). \quad (4.19)$$

Voir la figure 4.2.

Proposition 4.3 (théorème de dissymétrie pour les arbres avec feuilles \mathfrak{a})

Soit $\mathfrak{a}(X, T)$, l'espèce pondérée des arbres dont les sommets internes sont de sorte X et les feuilles sont de sorte T . Alors on a

$$\mathfrak{a}^{\bullet X}(X, T) + \mathfrak{a}^-(X, T) = \mathfrak{a}(X, T) + \mathfrak{a}^{X\bullet-}(X, T), \quad (4.20)$$

où les exposants \bullet_X , $-$, et $X\bullet-$, désignent le pointage en un point de sorte X , en une arête et en une paire incidente point de sorte X et arête, respectivement.

Preuve

La démonstration de cette proposition est très semblable à celle du théorème de dissymétrie pour les arbres. Voir (théorème 3.1).

Remarque 4.3

L'équation (4.20) peut être donnée sous la forme suivante

$$XE_{\geq 2}(\mathfrak{A}(X, T)) + \frac{1}{b}E_2(\mathfrak{A}(X, T)) = \mathfrak{a}(X, T) + \frac{1}{b}\mathfrak{A}(X, T)(\mathfrak{A}(X, T) - bT). \quad (4.21)$$

Soit $B(X, Z)$ l'espèce définie par l'équation

$$B(X, Z) = aZ^2 - aE_2(Z) - XE_{\geq 2}(Z). \quad (4.22)$$

L'espèce $B(X, Z)$ vérifie les conditions (4.5). En effet

$$\begin{aligned} \frac{\partial B}{\partial Z}(X, Z) &= 2aZ - aZ - XE_{\geq 1}(Z) \\ &= aZ - XE_{\geq 1}(Z), \end{aligned}$$

et

$$\frac{\partial^2 B}{\partial^2 Z}(X, Z) = a - XE(Z),$$

donc

$$\begin{aligned}\frac{\partial B}{\partial Z}(X, 0) &= a \cdot 0 - 0 \cdot E_{\geq 1}(0) \\ &= 0.\end{aligned}$$

et

$$\frac{\partial^2 B}{\partial^2 Z}(X, 0) = a \neq 0.$$

Alors l'équation (4.7) s'écrit

$$\begin{aligned}T &= \frac{\partial B}{\partial Z}(X, Z) \\ &= aZ - XE_{\geq 1}(Z),\end{aligned}\tag{4.23}$$

ce qui implique

$$Z = \frac{1}{a}T + \frac{1}{a}XE_{\geq 1}(Z).\tag{4.24}$$

À partir du théorème des espèces implicites (théorème 3.3), on en déduit que cette équation possède une unique solution qui est donnée par $Z = A(X, T)$, avec $b = 1/a$. Voir l'équation (4.19).

Proposition 4.4

Soit $\mathfrak{a}(X, T) = \mathfrak{a}_b(X, T)$ l'espèce pondérée à deux sortes des arbres avec feuilles dont les sommets internes sont de sorte X et les feuilles sont de sorte T . Supposons que $ab = 1$, alors la transformée de Legendre $F(X, T)$ de $B(X, Z)$ par rapport à Z , est donnée par l'espèce $\mathfrak{a}(X, T)$.

Preuve

Nous devons montrer que $F(X, T) = \mathfrak{a}(X, T)$. Or, d'après (4.8) et le théorème de dissymétrie pour les arbres avec feuilles (remarque 4.3) et posant $V(X, Z) = B(X, Z)$,

on en déduit que

$$\begin{aligned}
 F(X, T) &= T \cdot A(X, T) - B(X, A(X, T)) \\
 &= T \cdot A(X, T) - (aA^2(X, T) - aE_2(A(X, T)) - XE_{\geq 2}(A(X, T))) \\
 &= XE_{\geq 2}(A(X, T)) + aE_2(A(X, T)) - aA^2(X, T) + T \cdot A(X, T) \\
 &= XE_{\geq 2}(A(X, T)) + \frac{1}{b}E_2(A(X, T)) - \frac{1}{b}A^2(X, T) + T \cdot A(X, T) \\
 &= XE_{\geq 2}(A(X, T)) + \frac{1}{b}E_2(A(X, T)) - \frac{1}{b}A(X, T)(A(X, T) - bT) \\
 &= a(X, T).
 \end{aligned}$$

Ceci complète la preuve.

4.5 Généralisation

Définition 4.1

On note Par l'espèce des partitions (ensemblistes). Soit $\pi = \{p\}_{p \in \pi}$ une partition sur un ensemble U et soit g un graphe quelconque sur U . Désignons par g_π le multigraphe induit de g sur l'ensemble π : Chaque arête e dans g induit une arête dans g_π entre les blocs contenant les extrémités de e . Il y a donc possibilités de cycles en particulier de boucles, et d'arêtes multiples. Voir la figure 4.3.

Soit $N = N(X)$ une espèce de structures telle que $N[0] = 0$. Dans ce qui suit, une N -structure sur un ensemble U est appelée une *note*, par commodité. Nous utiliserons le diagramme de la figure 4.4 pour représenter une note.

Définition 4.2

Un \mathbb{C}_N -graphe sur un ensemble U est la donnée d'un triplet (π, n, g) où $\pi = \{p\}_{p \in \pi}$ est une partition sur U , $n = \{n_p\}_{p \in \pi}$ est une famille de N -structures (notes) avec n_p élément de $N[p]$ et g est un graphe sur l'ensemble des sommets U tel que le multigraphe induit g_π soit un arbre, autrement dit, un graphe connexe sans cycles, en particulier sans boucles, et sans arêtes multiples. Voir la figure 4.5.

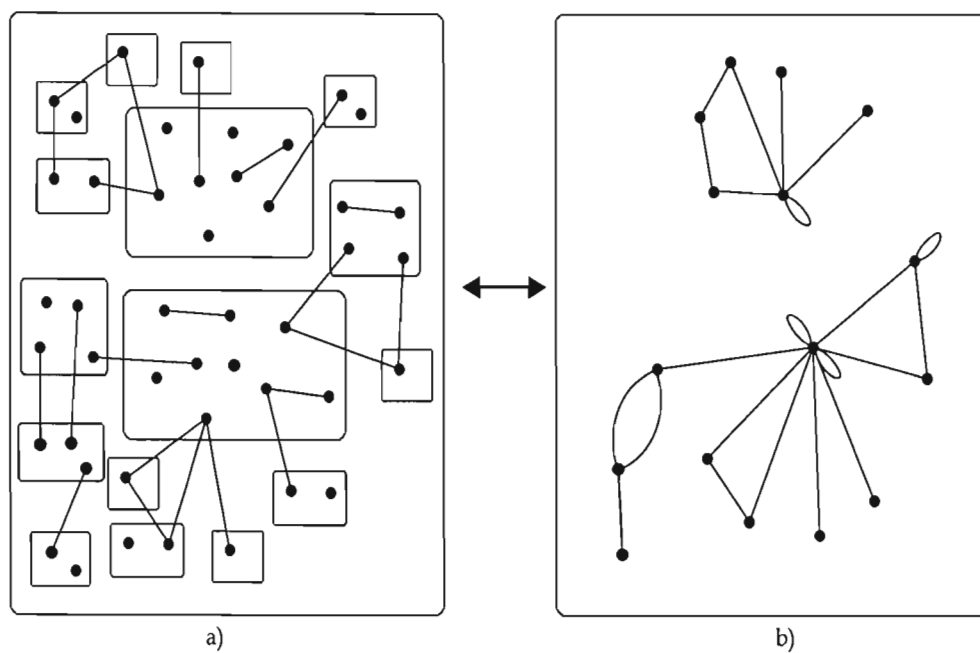


Figure 4.3 a) Un graphe g , b) le multigraphe induit g_π .

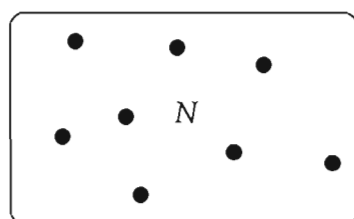


Figure 4.4 Une Note.

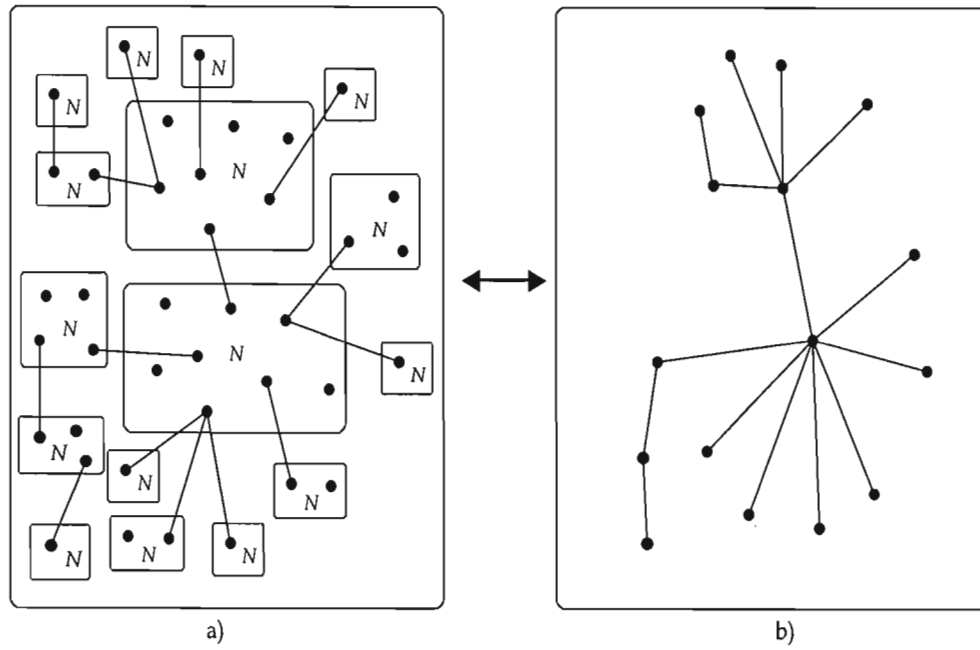


Figure 4.5 a) Un \mathfrak{C}_N -graphe g , b) le multigraphe induit g_π .

Proposition 4.5

Soit N , une espèce de structures, avec $N[0] = 0$. Alors

$$\mathfrak{C}_N^\bullet = N^\bullet(X \cdot E(\mathfrak{C}_N^\bullet)). \quad (4.25)$$

Preuve

Étant donné un graphe $g \in \mathfrak{C}_N^\bullet$, considérons la note à laquelle le sommet pointé appartient. Les autres sommets liés à cette note par des arêtes sont les racines de \mathfrak{C}_N^\bullet -structures. Voir la figure 4.6. \square

Proposition 4.6 (Version pondérée de la proposition 4.5)

Soit N , une espèce de structures, avec $N[0] = 0$, et $\mathfrak{C}_{N,b}$ est l'espèce \mathfrak{C}_N , pondérée par un compteur d'arêtes b . Alors,

$$\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(X) = N^\bullet(X \cdot E(b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(X))), \quad (4.26)$$

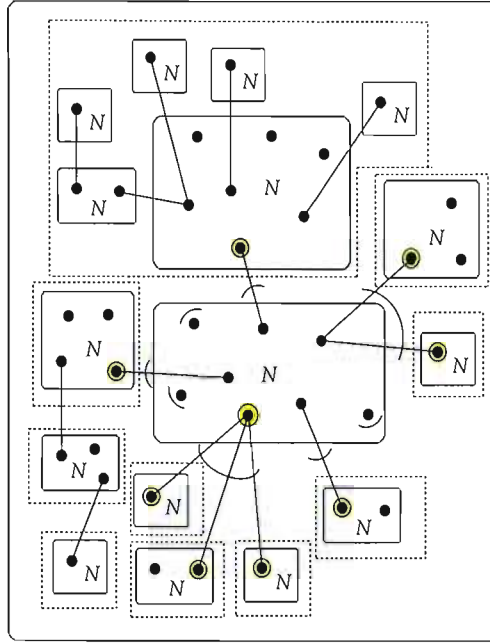


Figure 4.6 $\mathfrak{C}_N^\bullet = N^\bullet(X \cdot E(\mathfrak{C}_N))$.

Preuve

Étant donné un graphe $g \in \mathfrak{C}_{N,b}^\bullet$, considérons la note à laquelle le sommet pointé appartient. Les autres sommets liés à cette note par des arêtes sont les racines de $\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet$ -structures. Voir la figure 4.7.

Proposition 4.7 (théorème de dissymétrie pour les \mathfrak{C}_N -graphes)

Soit N , une espèce de structures, avec $N[0] = 0$. Alors on a

$$\mathfrak{C}_N^a + \mathfrak{C}_N^n = \mathfrak{C}_N + \mathfrak{C}_N^{an}, \quad (4.27)$$

où les exposants a , n , et an , désignent le pointage en une arête, en une note et en une paire incidente arête-note, respectivement.

Preuve

Le membre de gauche représente les graphes dans \mathfrak{C}_N qui sont pointés soit en une arête,

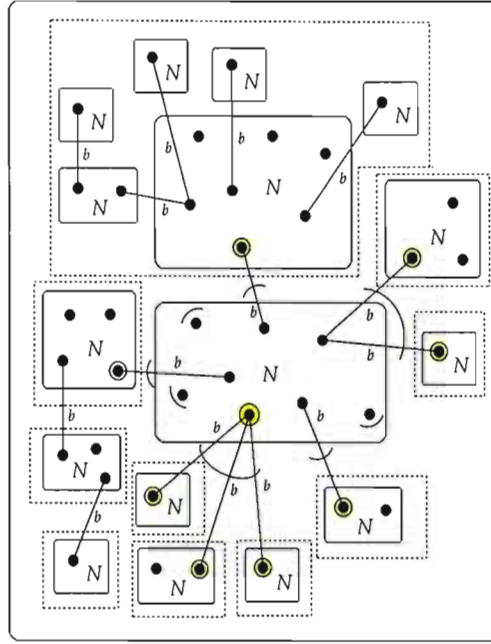


Figure 4.7 $\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(X) = N^\bullet \left(X \cdot E \left(b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(X) \right) \right)$.

soit en une note. Dans le membre de droite, le terme \mathfrak{C}_N peut être identifié aux graphes dans \mathfrak{C}_N qui ont été pointés de manière canonique, dans le an-centre du graphe. Il est clair que le an-centre est soit un isthme soit une note. Dans les autres cas, une bijection naturelle, entre les graphes dans \mathfrak{C}_N pointés en une arête ou en une note (hors du an-centre) et les graphes dans \mathfrak{C}_N pointés en une paire arête-note, obtenue en regardant en direction du centre, est illustrée à la figure 4.8.

Remarque 4.4

L'équation (4.27), peut être donnée sous la forme suivante

$$E_2(\mathfrak{C}_N^\bullet) + N(X \cdot E(\mathfrak{C}_N^\bullet)) = \mathfrak{C}_N + (\mathfrak{C}_N^\bullet)^2, \quad (4.28)$$

où E_2 désigne l'espèce des ensembles à deux éléments.

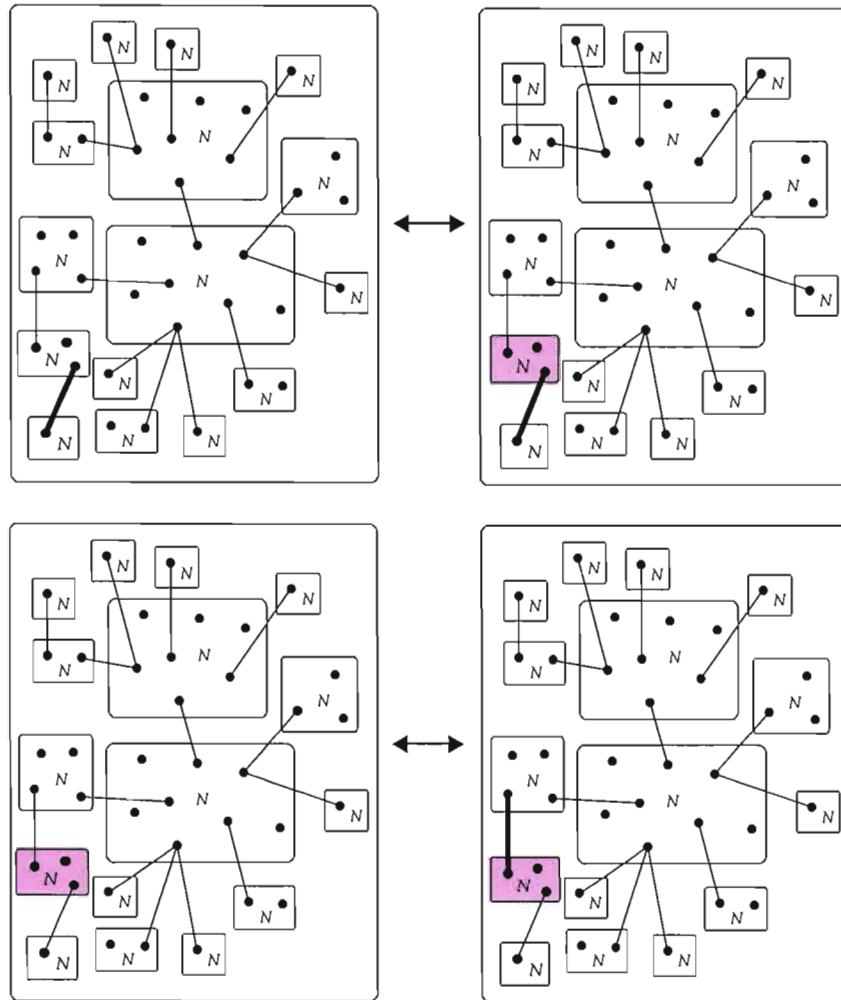


Figure 4.8 théorème de dissymétrie pour les \mathcal{C}_N -graphes.

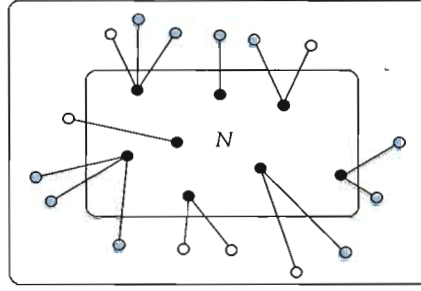


Figure 4.9 Une note avec pieds.

Proposition 4.8 (Version pondérée de la proposition 4.7)

Soit N , une espèce de structures, avec $N[0] = 0$, dont les structures sont appelées notes, et soit $\mathfrak{C}_{N,b}$ l'espèce \mathfrak{C}_N , pondérée par un compteur d'arête b . Alors on a

$$\mathfrak{C}_{N,b}^a + \mathfrak{C}_{N,b}^n = \mathfrak{C}_{N,b} + \mathfrak{C}_{N,b}^{an}, \quad (4.29)$$

où les exposants a , n , et an , désignent le pointage en une arête, en une note et en une paire incidente arête-note, respectivement.

Preuve

La démonstration de cette proposition est très semblable à celle de la proposition (4.7), la seule différence est qu'on ajoute un poids b sur les arêtes.

Remarque 4.5

L'équation (4.29), peut être donnée sous la forme suivante

$$bE_2(\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet) + N(X \cdot E(b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet)) = \mathfrak{C}_{N,b} + b(\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet)^2. \quad (4.30)$$

Considérons l'espèce à deux sortes $N(XE(Z))$. Un graphe $g \in N(XE(Z))$ est un N -graphe sur un ensemble de sommets, les éléments de sorte X , auxquels sont attachés un nombre quelconque de pieds de sorte Z . Voir la figure 4.9.

On a alors,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial Z} N(XE(Z)) &= XE(Z) N'(XE(Z)) \\ &= N^\bullet(XE(Z)).\end{aligned}\tag{4.31}$$

Définition 4.3

Soit $V_N(X, Z)$, l'espèce virtuelle pondérée à deux sortes, définie par

$$V_N(X, Z) = aZ^2 - aE_2(Z) - N(XE(Z)).\tag{4.32}$$

Le terme $aE_2(Z)$ peut être identifié à deux pieds attachées par une arête de poids a .

Alors, on a, par (4.31)

$$\begin{aligned}\frac{\partial V_N}{\partial Z}(X, Z) &= \frac{\partial}{\partial Z} (aZ^2 - aE_2(Z) - N(XE(Z))) \\ &= aZ - N^\bullet(XE(Z)).\end{aligned}\tag{4.33}$$

Définition 4.4

Soit $\mathcal{G}_N(X, T) = \mathcal{G}_{N,b}(X, T)$ l'espèce de structures pondérée à deux sortes, définie par

$$\mathcal{G}_N(X, T) = bE_2(T) + \mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT)),\tag{4.34}$$

où T dénote la sorte des "pieds" et $\mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT))$ est l'espèce $\mathfrak{C}_N(XE(T))$, pondérée par un compteur d'arêtes b .

Par convention une $bE_2(T)$ -structure peut être identifiée à deux pieds attachées par une arête de poids b . Voir la figure 4.10.

Noter que

$$\frac{\partial}{\partial T} \mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT)) = b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(XE(bT)).\tag{4.35}$$

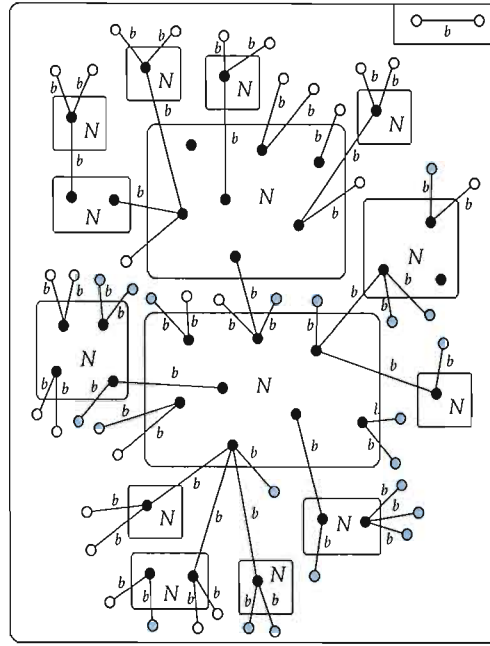


Figure 4.10 $\mathcal{G}_N(X, T) = bE_2(T) + \mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT))$.

Définition 4.5

Soit $\mathcal{A}_N(X, T) = \mathcal{A}_{N,b}(X, T)$, l'espèce de structures pondérée à deux sortes, définie par

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_N(X, T) &= \frac{\partial}{\partial T} \mathcal{G}_N(X, T) \\
 &= \frac{\partial}{\partial T} (bE_2(T) + \mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT))) \\
 &= bT + b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(XE(bT)).
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

Proposition 4.9

L'espèce $\mathcal{A}_N(X, T)$, satisfait l'équation fonctionnelle suivante

$$\mathcal{A}_N(X, T) = bT + bN^\bullet(XE(\mathcal{A}_N(X, T))). \tag{4.37}$$

Preuve

Cette relation est une conséquence immédiate de la formule (4.26) de la proposition 4.6.

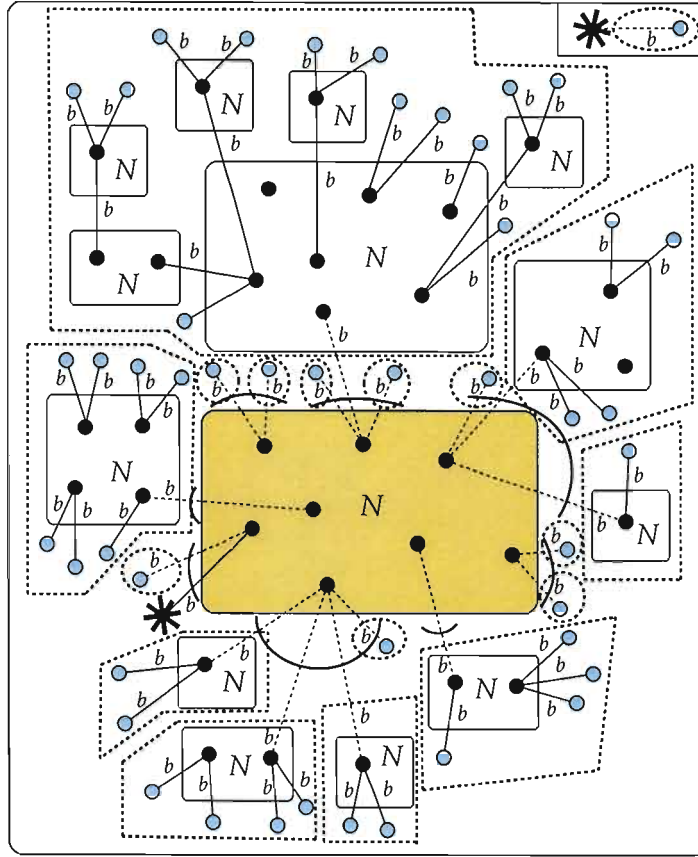


Figure 4.11 $\mathcal{A}_N(X, T) = bT + bN^\bullet(XE(\mathcal{A}_N(X, T)))$.

En effet,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_N(X, T) &= bT + b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(XE(bT)) \\
 &= bT + b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(X)|_{X:=XE(bT)} \\
 &= bT + bN^\bullet(XE(bT) \cdot E(b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(XE(bT)))) \\
 &= bT + bN^\bullet(X \cdot E(bT + b\mathfrak{C}_{N,b}^\bullet(XE(bT)))) \\
 &= bT + bN^\bullet(XE(\mathcal{A}_N(X, T))).
 \end{aligned}$$

Cette relation peut être démontrée aussi par une argumentation graphique. Voir la figure 4.11.

Proposition 4.10 (théorème de dissymétrie pour les \mathcal{G}_N -graphes).

Soit N , une espèce de structures, avec $N[0] = 0$, et soit $\mathcal{G}_N(X, T) = \mathcal{G}_N(XE(bT))$, l'espèce de structures définie par

$$\mathcal{G}_N(X, T) = bE_2(T) + \mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT)).$$

Alors on a

$$\mathcal{G}_N^a(X, T) + \mathcal{G}_N^n(X, T) = \mathcal{G}_N(X, T) + \mathcal{G}_N^{an}(X, T). \quad (4.38)$$

où les exposants a, n, et an, désignent le pointage en une arête, en une note et en une paire incidente arête-note, respectivement.

Preuve

La démonstration de cette relation est très semblable à celle du théorème de dissymétrie pour les \mathfrak{C}_N -graphes.

Remarque 4.6

L'équation (4.38) peut être donnée sous la forme suivante

$$N(XE(\mathcal{A}_N)) + \frac{1}{b}E_2(\mathcal{A}_N) = \mathcal{G}(X, T) + \frac{1}{b}\mathcal{A}_N(\mathcal{A}_N - bT), \quad (4.39)$$

où $\mathcal{A}_N = \mathcal{A}_N(X, T)$.

Soit N une classe de notes et soit $V_N(X, Z)$ l'espèce définie par l'équation (4.32).

On a,

$$\frac{\partial V_N}{\partial Z}(X, Z) = aZ - N^\bullet(XE(Z)),$$

et l'équation (4.7) s'écrit

$$\begin{aligned} T &= \frac{\partial V_N}{\partial Z}(X, Z) \\ &= aZ - N^\bullet(XE(Z)), \end{aligned} \quad (4.40)$$

ce qui implique

$$Z = \frac{1}{a}T + \frac{1}{a}N^\bullet(XE(Z)). \quad (4.41)$$

À partir du théorème des espèces implicites (théorème 3.3), on en déduit que cette équation possède une unique solution $Z = A(X, T)$ qui est donnée par $Z = \mathcal{A}_N(X, T) = \mathcal{A}_{N,b}(X, T)$, avec $b = 1/a$. Voir la proposition 4.9.

Théorème 4.2

Soit N , une espèce de structures, avec $N[0] = 0$, et supposons que $ab = 1$. Alors la transformée de Legendre $F(X, T)$ de $V_N(X, Z)$ par rapport à Z , est donnée par l'espèce $\mathcal{G}_N(X, T) = \mathcal{G}_{N,b}(X, T)$, définie par l'équation

$$\mathcal{G}_N(X, T) = bE_2(T) + \mathfrak{C}_{N,b}(XE(bT)).$$

Preuve

Nous devons montrer que $F(X, T) = \mathcal{G}_N(X, T)$. Or, d'après (4.8) et le théorème de dissymétrie pour les \mathcal{G}_N -graphes (remarque 4.6) et posant $\mathcal{A}_N = \mathcal{A}_N(X, T)$, on en déduit que

$$\begin{aligned} F(X, T) &= T\mathcal{A}_N(X, T) - V_N(X, \mathcal{A}_N(X, T)) \\ &= T\mathcal{A}_N - V_N(X, \mathcal{A}_N) \\ &= T\mathcal{A}_N - (a\mathcal{A}_N^2 - aE_2(\mathcal{A}_N) - N(XE(\mathcal{A}_N))) \\ &= aE_2(\mathcal{A}_N) + N(XE(\mathcal{A}_N)) - a\mathcal{A}_N^2 + \mathcal{A}_NT \\ &= aE_2(\mathcal{A}_N) + N(XE(\mathcal{A}_N)) - a\mathcal{A}_N \left(\mathcal{A}_N - \frac{1}{a}T \right) \\ &= \frac{1}{b}E_2(\mathcal{A}_N) + N(XE(\mathcal{A}_N)) - \frac{1}{b}\mathcal{A}_N(\mathcal{A}_N - bT) \\ &= \mathcal{G}_N(X, T). \end{aligned}$$

Ceci complète la preuve.

□

CONCLUSION

Au siècle dernier, il n'y avait pas dans la littérature mathématique de lien entre la notion d'espèces de structures et la transformation de Legendre. Pierre Leroux a été le premier à relier ces deux notions (Transformation de Legendre et espèces de structures). Il a démontré (Leroux, 2003), que l'espèce $\mathcal{G}_M(X, T)$ est la transformée de Legendre de l'espèce $V_M(X, Z)$. Ce travail a été consacré à cette preuve combinatoire.

Plus précisément, dans le cadre de ce travail de recherche à la maîtrise, nous avons étudié l'espèce $\mathcal{G}_M(X, T)$ qui est la transformation de Legendre de l'espèce $V_M(X, Z)$ par rapport à Z , et nous avons montré que l'espèce M des graphes irréductibles, introduite dans la définition de l'espèce $\mathcal{G}_M(X, T)$, peut être remplacée par une espèce N quelconque, avec $N[0] = 0$.

Les sujets abordés dans ce mémoire ouvrent la voie vers plusieurs champs de recherche possibles. On pourrait par exemple, étudier des potentiels thermodynamiques qui ont la forme suivante : $a \frac{z^2}{2} - N(x \exp(z))$, où N est une fonction d'état.

Finalement, ce mémoire nous a permis d'acquérir une plus grande compréhension de plusieurs notions en analyse, en thermodynamique et en théorie des espèces : Les fonctions convexes, la transformation de Legendre d'une fonction dérivable et convexe, l'inégalité de Young, l'énergie interne, l'entropie, la fonction de partition, les potentiels thermodynamiques (l'enthalpie, l'énergie libre, l'enthalpie libre et le grand potentiel), les graphes connexes, les graphes inséparables (2-connexes), les graphes irréductibles (2-arêtes connexes), les espèces de structures et la transformation de Legendre des espèces de structures à une sorte et à deux sortes.

BIBLIOGRAPHIE

- Arnold, V. I. (1974). « Mathematical Methods of Classical Mechanics ». Graduate Texts in Mathematics, Springer-Verlag, New York, 462 pp.
- Bergeron, F., Labelle, G. et Leroux, P. (1994). « Théorie des espèces et combinatoire des structures arborescentes ». Montréal : Publications du LaCIM, Vol. 19, 394 pp.
- Berkovitz, L. D. (2002). « Convexity and Optimization in \mathbb{R}^n ». Pure and Applied Mathematics, A Wiley Interscience Serie of Texts, Monographs, and Tracts, New York, 268 PP.
- Dorlas, T. C. (1999). « Statistical Mechanics Fundamentales and Model Solutions ». Institute of Physics Publishing, Bristol and philadelphia, 273 pp.
- Hanlon, Phil. (1981). « A Cycle Index Sum Inversion Theorem ». Journal of combinatorial theory, series A, 30, 284-269.
- Hanlon, P. et Robinson, R. W. (1981). « Counting Bridgeless Graphs ». Journal of combinatorial theory, series B, 33, 276-305.
- Hulin, M., Hulin, N. et Veyssié M. (1989). « Thermodynamique ». Dumod, Paris, 370 pp.
- Joyal, André. (1981). « Une théorie combinatoire des séries formelles ». Advances in Mathematics, 42, 1-82.
- Labelle, Gilbert. (1986). « On Combinatorial Differential Equations ». Journal of Mathematical Analysis and Applications, 113, 344-381.
- Labelle, Jacques. (1981). « Théorie des Graphes ». Montréal : Modulo Éditeur, 183 pp.
- Leroux, Pierre. (2004). « Enumerative problems inspired by Mayer's theory of cluster integrals ». The Electronic journal of combinatorics, vol.11, R32.
- Leroux, Pierre. (2003). « Note on Legendre transform and line-irreducible graphs ». Bertinoro : Séminaire Lotharingien de Combinatoire.
- Leroux, Pierre. (1983). « Algèbre linéaire : une approche matricielle ». Montréal : Modulo Éditeur, 500 pp.
- Leroux, P. et Miloudi, B. (1992). « Généralisations de la formule d'Otter ». Annales des Sciences Mathématiques du Québec, 16, 53-80.

- Ngô, C. Ngô, H. (1995). « Physique statistique à l'équilibre et hors d'équilibre ». Masson, Paris, 358 pp.
- Robinson, Robert. W. (1970). « Enumeration of Non-Separable Graphs ». Journal of combinatorial theory, series B, 9, 327-356.
- Stauffer, D. et Stanley, H.E. (1989). « From Newton to Mandelbrot A Primer in Theoretical Physics ». Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 364 pp.
- Vasiliev, A.N. (1998). « Functional Methods in Quantum Field Theory and Statistical Physics ». Gordon and Breach Science Publishers, Canada, 312 pp.
- Vauclair, Sylvie. (1993). « Éléments de physique statistique Hasard, organisation, évolution ». InterEditions, Paris, 268 pp.